

\*\*\*

УДК 66.011:51-7

## CFD-МОДЕЛИРОВАНИЕ ПРОЦЕССА СИНТЕЗА БСПЭ В РЕАКТОРЕ С ПСЕВДООЖИЖЕННЫМ СЛОЕМ

В.В. Плющев<sup>1</sup>, В.В. Бронская<sup>2</sup>, Г.В. Мануйко<sup>3</sup>, М.А. Назарова<sup>4</sup>

<sup>1</sup>Казанский национальный исследовательский технологический университет,  
Россия, Казань, [vp220293@gmail.com](mailto:vp220293@gmail.com)

<sup>2</sup>Казанский национальный исследовательский технологический университет,  
Россия, Казань, [dweronika@mail.ru](mailto:dweronika@mail.ru)

<sup>3</sup>Казанский национальный исследовательский технологический университет,  
Россия, Казань, [galiya\\_vm@mail.ru](mailto:galiya_vm@mail.ru)

<sup>4</sup>Казанский национальный исследовательский технологический университет,  
Россия, Казань, [mashynia-lovely@mail.ru](mailto:mashynia-lovely@mail.ru)

*Аннотация.* Рассматривается гидродинамика псевдооживления в реакторе сополимеризации пропилена и этилена. Проведен анализ для определения, как количество ячеек, узлов сетки и модель турбулентности влияют на ход и результаты расчетов. Получены поля скоростей, давлений, определены критические скорости псевдооживления.

*Ключевые слова:* математическая модель, синтез, БСПЭ, псевдооживленный слой.

## CFD-MODELING OF THE SYNTHESIS PROCESS BCPE IN A FLUIDIZED BED REACTOR

V.V. Plushchev<sup>1</sup>, V.V. Bronskaya<sup>2</sup>, G.V. Manuyko<sup>3</sup>, M.A. Nazarova<sup>4</sup>,

<sup>1</sup>Kazan National Research Technological University,  
Russia, Kazan, [vp220293@gmail.com](mailto:vp220293@gmail.com)

<sup>2</sup>Kazan National Research Technological University,  
Russia, Kazan, [dweronika@mail.ru](mailto:dweronika@mail.ru)

<sup>3</sup>Kazan National Research Technological University,  
Russia, Kazan, [galiya\\_vm@mail.ru](mailto:galiya_vm@mail.ru)

<sup>4</sup>Kazan National Research Technological University,  
Russia, Kazan, [mashynia-lovely@mail.ru](mailto:mashynia-lovely@mail.ru)

*Abstract.* The article considers the hydrodynamics of fluidization in the copolymerization reactor of propylene and ethylene. The analysis is carried out to determine how the number of cells, grid nodes and turbulence model affect the course and results of calculations. The velocity and pressure fields are obtained and the critical fluidization rates are determined.

*Key words:* mathematical model, synthesis, BCPE, fluidized bed.

Производство блок-сополимеров пропилена и этилена является дружественным к экологии (альтернативные условия реакции – без растворителя, в среде жидкого мономера), осуществляется с использованием современных технологий, поэтому актуальным является описание гидродинамики процесса блок-сополимеризации пропилена и этилена на Ti-Mg каталитической системе и проведение численных экспериментов, с целью выявления рационального режима процесса синтеза.

В работах [1-3] предпринята попытка всестороннего исследования массо-, теплопереноса, кинетики и гидродинамики при синтезе каучуков общего назначения, в данный момент возникла необходимость в исследовании синтеза БСПЭ (блок-сополимера пропилена и этилена) в реакторе с псевдооживленным слоем [4-7]. Турбулентный псевдооживленный слой характеризуется двумя различными сосуществующими областями: нижней плотной областью и разбавленной, дисперсной областью потока. Второй характеристикой турбулентного псевдооживления является высокое значение дисперсионных коэффициентов для твердых тел. Duet и др. [8, 9] исследовали коэффициенты дисперсии в турбулентном режиме и пришли к выводу, что их значения намного выше, чем при других режимах потока. Vi и др. [10] представили обзор турбулентного псевдооживления. В обзорной статье обобщены многие ценные

сведения о турбулентном псевдоожигении, такие как существование и переход к турбулентному псевдоожигению, смешение газ-твердые тела, тепло-и массообмен, унос твердых тел в турбулентных псевдоожигенных слоях и моделирование, и производительность реактора; также рассмотрены аспекты, которые необходимо развивать в будущем. Ellis и др. [11] выполнено экспериментальное исследование гидродинамики в турбулентном кипящем слое частиц в колоннах диаметром 0.26, 0.61 и 1.56 м, и исследованы эффекты увеличения масштаба в турбулентных псевдоожигенных слоях.

С увеличением вычислительной мощности CFD-моделирование предлагает новый подход к пониманию гидродинамики и механизмов переноса в многофазных потоках. Построение CFD - модели синтеза каучука БСПЭ и программная реализация проводилась на основе комплекса ANSYS FLUENT.

Чтобы подтвердить, что результаты CFD моделирования не зависят от размера ячейки, проведено построение трех видов сеток. Проведен анализ для определения, как количество ячеек, узлов сетки и модель турбулентности влияют на ход и результаты расчетов. В табл. 1 приведены характеристики трех используемых сеток.

Таблица 1. Количество узлов и ячеек расчетных сеток 1-3

	Сетка 1	Сетка 2	Сетка 3
Число узлов	169187	790803	842142
Количество ячеек	747432	4155431	4382680

Графики невязок для сеток 1-3 и моделей турбулентности (рис. 1÷6).

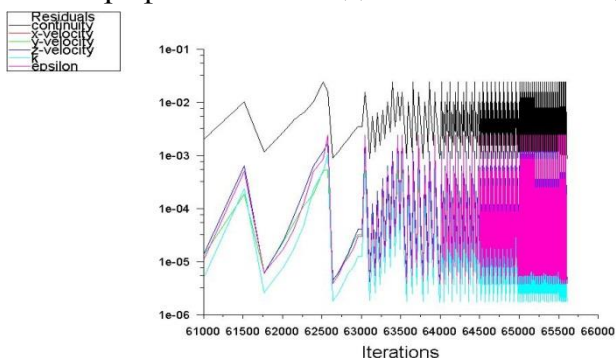


Рис. 1. Сетка 1, модель турбулентности k-epsilon

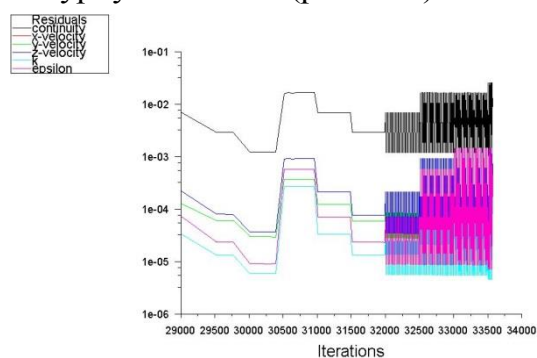


Рис. 2. Сетка 2, модель турбулентности k-epsilon

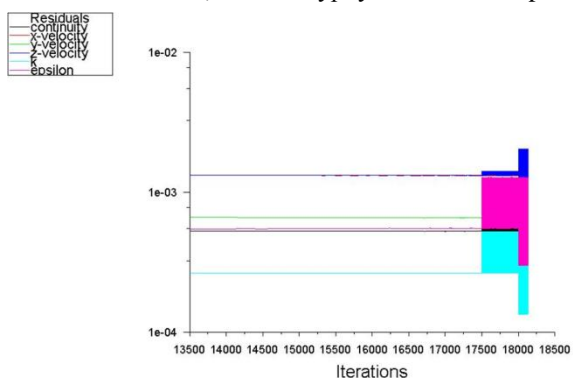


Рис. 3. Сетка 3, модель турбулентности k-epsilon

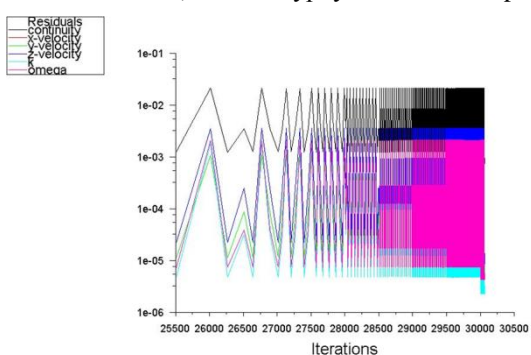


Рис. 4. Сетка 1, модель турбулентности k-omega

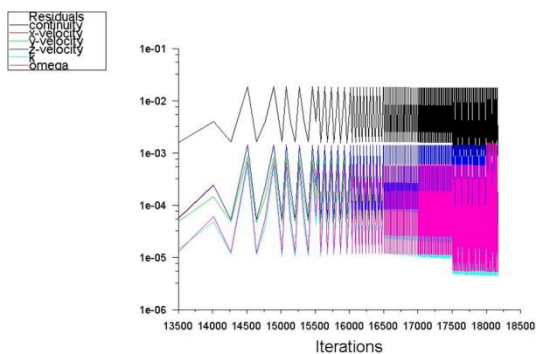


Рис. 5. Сетка 2, модель турбулентности k-omega

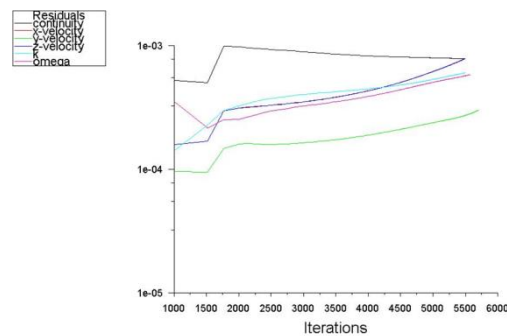


Рис. 6. Сетка 3, модель турбулентности k-omega

Из-за высокой концентрации частиц в твердых газообразных турбулентных псевдооживенных слоях нельзя пренебрегать взаимодействием частиц с частицами. Кроме того, твердая фаза имеет свойства, аналогичные свойствам непрерывной жидкости. Поэтому при моделировании использована модель Эйлера (1)-(5) в ANSYS FLUENT – важный инструмент моделирования для изучения потока частиц твердой фазы, включающего сложные межфазные передачи импульса.

Основные уравнения, которые применялись при моделировании

Уравнение неразрывности для газовой фазы

$$\frac{\partial(\alpha_g \rho_g)}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_j} (\alpha_g \rho_g u_{gj}) = 0. \quad (1)$$

Уравнение неразрывности для твердой фазы

$$\frac{\partial(\alpha_p \rho_p)}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_j} (\alpha_p \rho_p u_{pj}) = 0. \quad (2)$$

$$\alpha_p + \alpha_g = 1. \quad (3)$$

Уравнение моментов для газовой фазы

$$\frac{\partial}{\partial t} (\alpha_g \rho_g u_{gi}) + \frac{\partial}{\partial x_j} (\alpha_g \rho_g u_{gi} u_{gj}) = -\alpha_g \frac{\partial p}{\partial x_i} + \frac{\partial \tau_{g,ij}}{\partial x_j} - \beta(u_{gi} - u_{pi}) + \rho_g \alpha_g g_i. \quad (4)$$

Уравнение моментов для твердой фазы

$$\frac{\partial}{\partial t} (\alpha_p \rho_p u_{pi}) + \frac{\partial}{\partial x_j} (\alpha_p \rho_p u_{pi} u_{pj}) = -\alpha_p \frac{\partial p}{\partial x_i} + \frac{\partial \tau_{p,ij}}{\partial x_j} - \beta(u_{pi} - u_{gi}) + \rho_p \alpha_p g_i, \quad (5)$$

где  $\alpha_p$  и  $\alpha_g$  – объемная доля для твердой и газовой фазы;  $\rho_p$  и  $\rho_g$  – плотность твердой и газовой фазы, кг/м<sup>3</sup>;  $u_{pj}$  и  $u_{gj}$  – скорость твердой и газовой фазы, м/с;  $\beta$  – коэффициент обмена между фазами, кг/(м<sup>3</sup>\*с);  $g_i$  – ускорение свободного падения, м/с<sup>2</sup>;  $\tau_{p,ij}$  и  $\tau_{g,ij}$  – тензоры напряжений для твердой и газовой фазы, Па;  $p$  – давление, Па, соответственно.

Выполнены следующие шаги:

- настройка закона сопротивления для гранулированного потока газ – твердые частицы;
- использование модели Эйлера для прогнозирования падения давления в равномерно псевдооживенном слое;
- решение поставленной задачи, используя соответствующие настройки решателя;
- постобработка полученных данных.

Поток газовой фазы движется снизу-вверх, граничные условия установлены для скорости на входе как для газовой, так и для твердой фаз, направление потока газа или частиц является нормальным к поверхности входа. Граничное условие в верхней части

слоя представляет собой границу давления, зафиксированную при эталонном значении (атмосферном). На стенках аппарата – граничные условия без скольжения как для газовой, так и для твердой фаз. Размер частиц твердой фазы выбран 0,9-1,1 мм.

На рис. 7, 8 показано образование и движение пузырьков в турбулентном псевдооживленном слое. Режим псевдооживления при центральном вводе достигался при 0,6 м/с, при этом максимальное сопротивление аппарата после достижения равномерного псевдооживления составило 200 Па при центральном вводе.

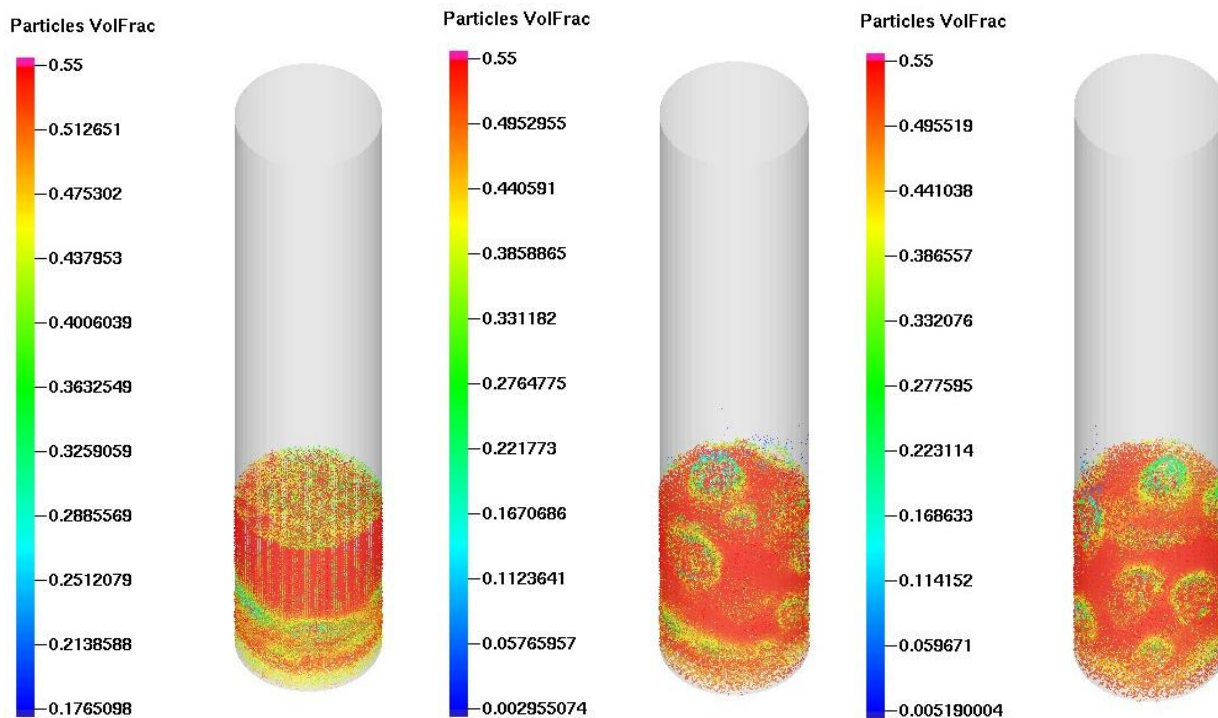


Рис. 7. Визуализация объемной доли частиц по высоте аппарата по времени 1,5 с;90 с;100 с и при скорости 0,6 м/с с центральным вводом потока

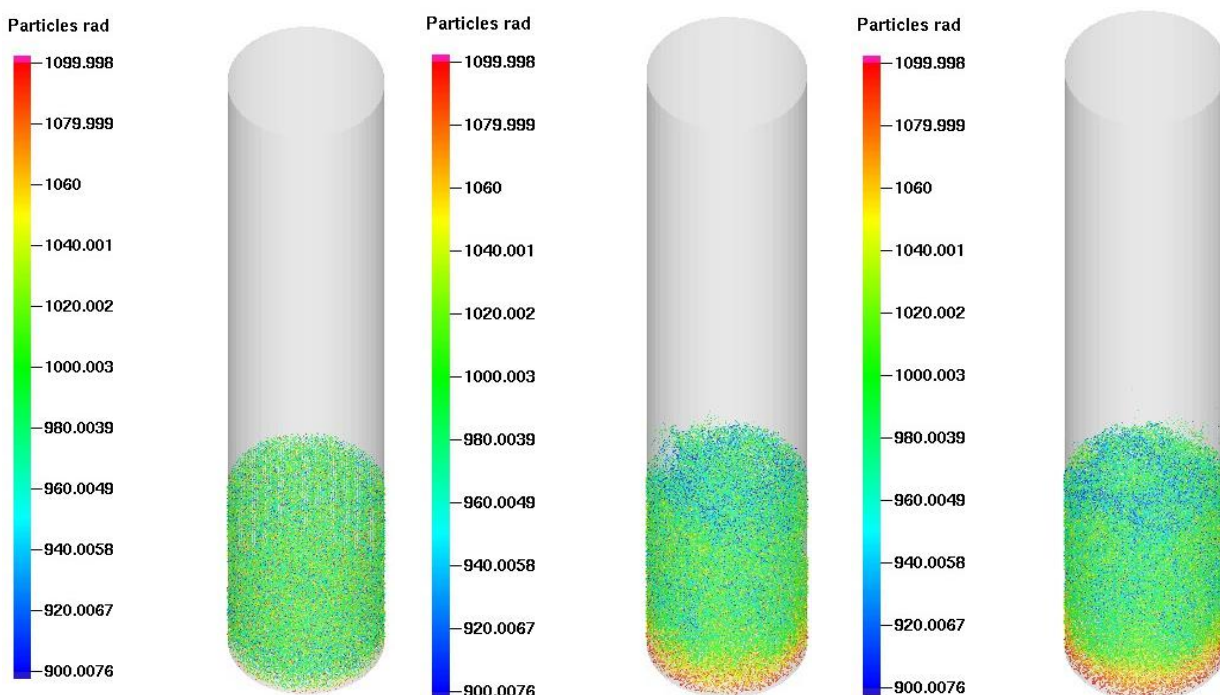




Рис. 8. Размещение частиц катализатора с учетом роста полимера (изменение радиуса частиц) в объеме аппарата при 1,5 с; 40 с; 90 с, при 0,6 м/с с центральным вводом потока

Для достоверности моделирования турбулентного псевдооживления проведено сравнение используемой модифицированной модели сопротивления и моделей Gidaspow, Syamlal-O'Brien и McKeen. Модели сопротивления Gidaspow, Syamlal-O'Brien и McKeen в своем первоначальном виде не позволяют предсказать гидродинамику частицы в турбулентном псевдооживленном слое. Все они не учитывали основные характеристики турбулентного режима псевдооживления: сосуществование разбавленной и плотной фаз.

В результате численного моделирования установлено, что при постоянной скорости частицы катализатора с минимальным радиусом при псевдооживлении находятся в центре верхнего слоя, с увеличением диаметра – частицы смещаются вниз. Экспериментальные и численные результаты показывают, что существуют две различные сосуществующие области: нижняя плотная, пузырьковая область и разбавленная область дисперсного потока в турбулентном псевдооживленном слое. С увеличением скорости газа, высота и средняя плотность твердой фазы уменьшаются, а средняя плотность в разбавленной фазе увеличивается. Увеличение скорости газа усугубляет степень турбулентности потока, приводящее к неравномерности концентрации частиц в радиальном направлении. Динамические характеристики потока газа и твердых частиц в псевдооживленном слое были исследованы методом CFD-моделирования, включающим модифицированную модель сопротивления, которая дает обоснованный гидродинамический прогноз по сравнению с экспериментальными данными в турбулентном псевдооживленном слое. Дальнейшее исследование будет направлено на изучение структуры потоков при различном вводе газовых потоков с учетом химической реакции, усредненного по времени профиля плотности слоя для определения рационального режима ведения процесса синтеза БСПЭ.

#### Библиографический список

1. Аминова Г.А., Мануйко Г.В., Игнашина Т.В., Бронская В.В., Захарова О.В., Дьяконов Г.С., Архиреев В.П. Исследование совместно протекающих процессов химического превращения и теплообмена при синтезе каучука СКДК в каскаде из двух реакторов непрерывного действия // Инженерно-физический журнал. 2005. Т. 78. № 3. С. 115-122.
2. Аминова Г.А., Мануйко Г.В., Вронская В.В., Игнашина Т.В., Исмагилова А.И., Дьяконов Г.С. Математическое моделирование процесса синтеза бутадиенового каучука на неодимсодержащей каталитической системе // Высокомолекулярные соединения. Серия А. 2006. Т. 48. № 8. С. 1495-1501.
3. Аминова Г.А., Мануйко Г.В., Игнашина Т.В., Бронская В.В., Захарова О.В., Дьяконов Г.С. Определение оптимальных параметров ведения процесса полимеризации при синтезе каучука СКДК // Химическая промышленность сегодня. 2004. № 3. С. 41-48.
4. Nele, M.; Pinto, J.C. Dynamic Behavior of a Continuous Autothermal Isobutylene Polymerization Reactor J Appl Polym Sci. 1997. 35. 1403-1413.
5. der Ven, S. V. Polypropylene and Other Polyolefins: Polymerization and Characterization; Elsevier Science: Amsterdam. 1990.
6. Новые технологии переработки пластмасс [Электронный ресурс]– Режим доступа: [http://www.polymer.ru/letter.php?n\\_id=4942](http://www.polymer.ru/letter.php?n_id=4942),
7. Плющев В.В., Аминова Г.А., Бронская В.В., Мануйко Г.В. Моделирование кинетики сополимеризации этилена и пропилена в реакторе с псевдооживленным слоем / Математические методы в технике и технологиях – ММТТ. 2018. Т. 3. С. 135-139.
8. Du B, Warsito W, Fan LS. Nonhomogeneity in turbulent gas-solid fluidization. AIChE J. 2003. 49:1109-1126.
9. Du B, Fan LS, Wei F, Warsito W. Gas and solids mixing in a turbulent fluidized bed. AIChE J. 2002. 48:1896-1909.
10. Bi HT, Ellis N, Abba IA, Grace JR. A state-of-the-art review of gas-solid turbulent fluidization. Chem Eng Sci. 2000. 55:4789-4825.
11. Ellis N, Bi HT, Lim CJ, Grace JR. Hydrodynamics of turbulent fluidized beds of different diameters. Powder Technol. 2004. 141:124-136.