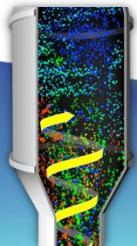


Barracuda在炼化行业中的应用案例

Peter Blaser and Paul Zhao
CPFD Software

Barracuda Virtual Reactor Symposium
Beijing, China
May 16, 2014



www.cpfd-software.com

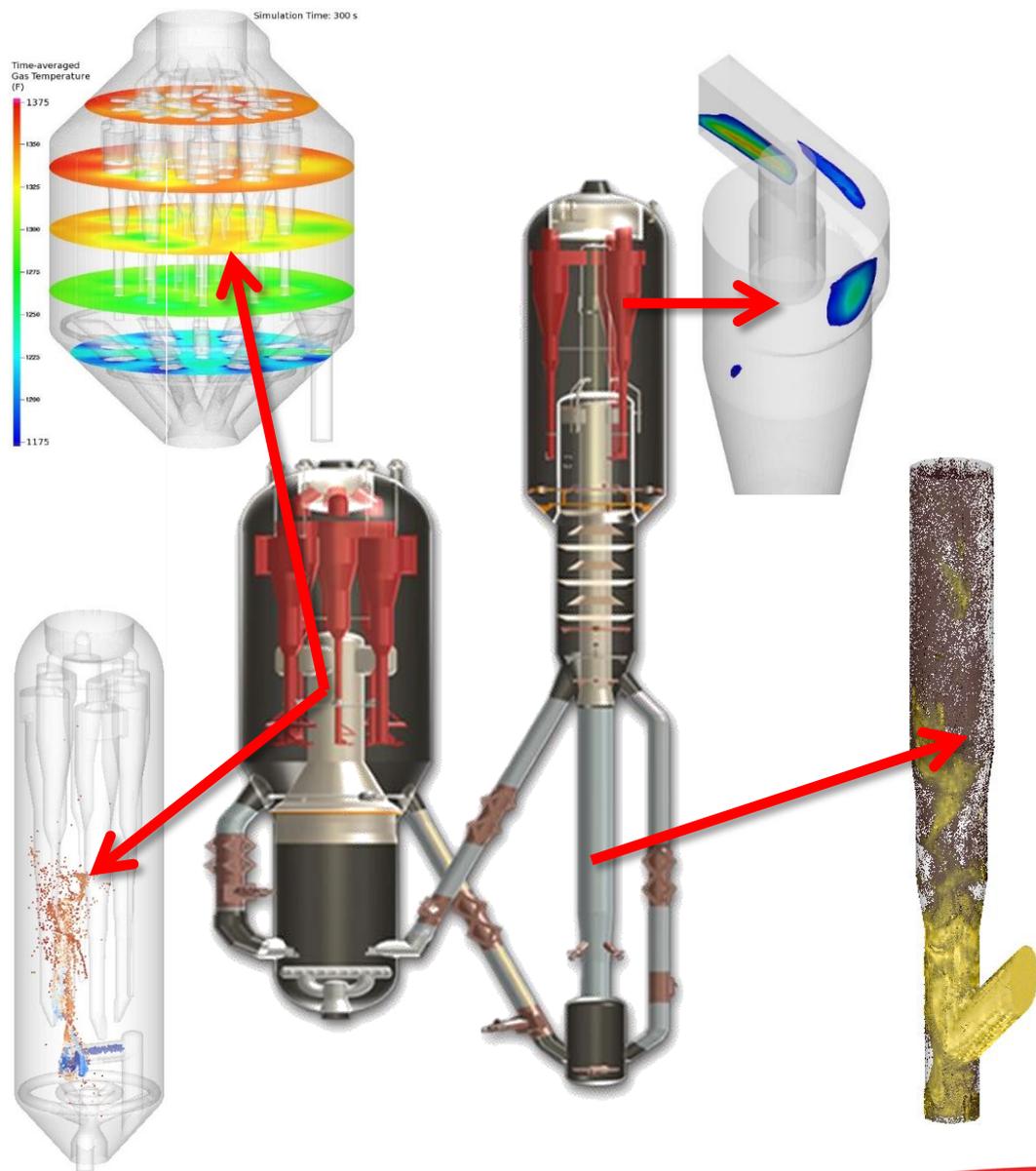
SIMULATE > UNDERSTAND > OPTIMIZE

BARRACUDA VR[®]

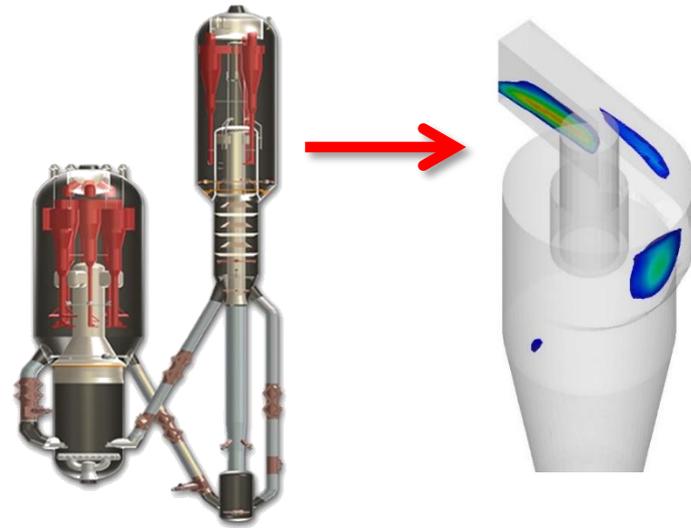
cpfd COMPUTATIONAL
PARTICLE
FLUID DYNAMICS

内容

- FCC反应器分离装置中减缓磨蚀问题的研究
- Barracuda在FCC提升装置中汽油生产中的应用
- FCC再生器后燃室的研究
- FCC再生器减排及减缓磨蚀问题的研究

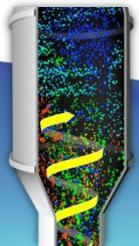


案例 1: FCC反应器分离装置减缓磨蚀问题的研究



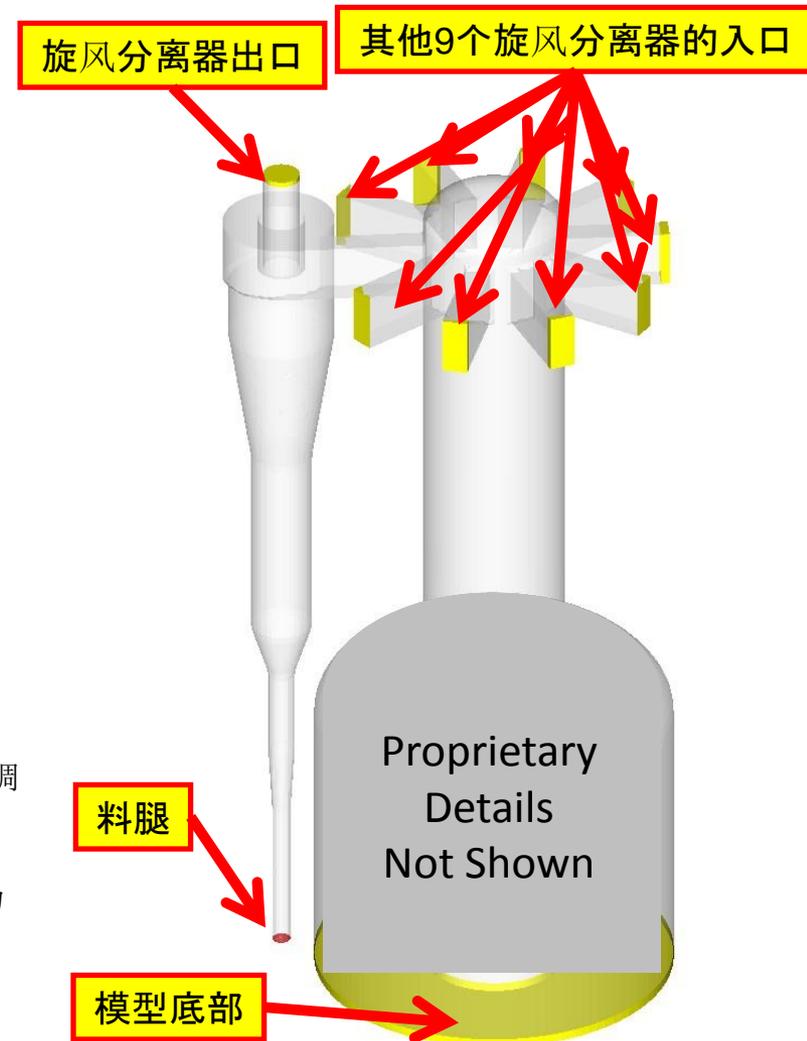
目标

- 位于Catleesburg的一条UOP液体催化裂化工艺生产线计划一场检修，检修内容包括更换反应器上被磨损的旋风分离器
- 目标：
 - 新更换的旋风分离器是否会减缓磨损？
 - 新的旋风分离器有几种设计方案，哪种方案效果最佳？
 - 新更换的旋风器是否会带来其他未预料的不利影响？



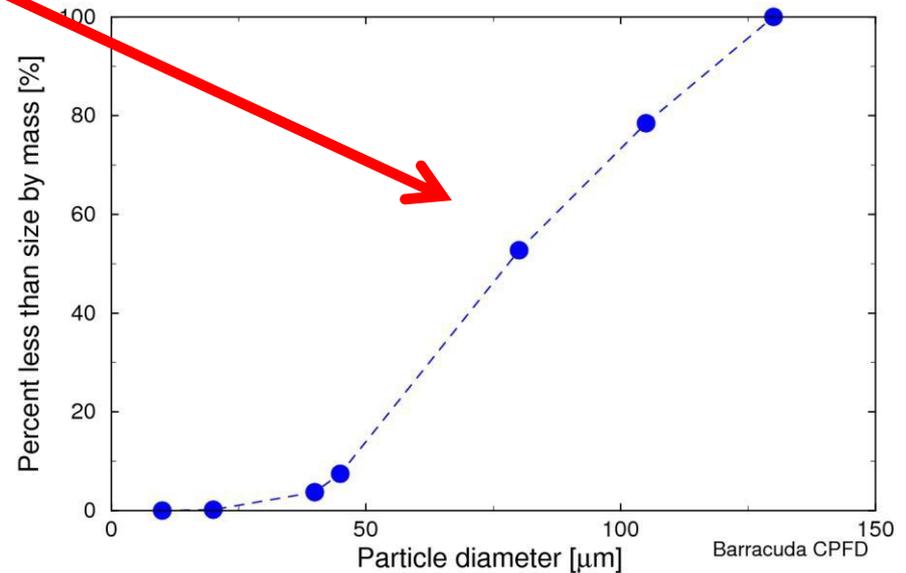
边界条件

- 气相物性
 - 分子质量= 70.59 g/mol
 - 粘度= 0.019 cp
 - 温度= 990° F (805K)
- 气相边界条件:
 - 料斗臂: 气体从料斗臂进入反应器, 流量为 1920 ACFS (125.156 kg/s)
 - 旋风分离器出口: 压力出口, 压力值为211,386 Pa (绝压) (即入口和出口间有1.1PSI的压力降(入口呀为24.56PSIG))。
 - 模型底部: 压力边界, 允许颗粒流出, 同时允许气体进入, 调整边界压力值, 使得气体流量为2060ACFS。
 - 其他旋风分离器入口: 其他9个旋风分离器的入口均采用压力边界条件, 调整压力值, 使得每个压力入口的流量相同。
 - 旋风分离器料腿: 非常少的一部分气体从料腿流出

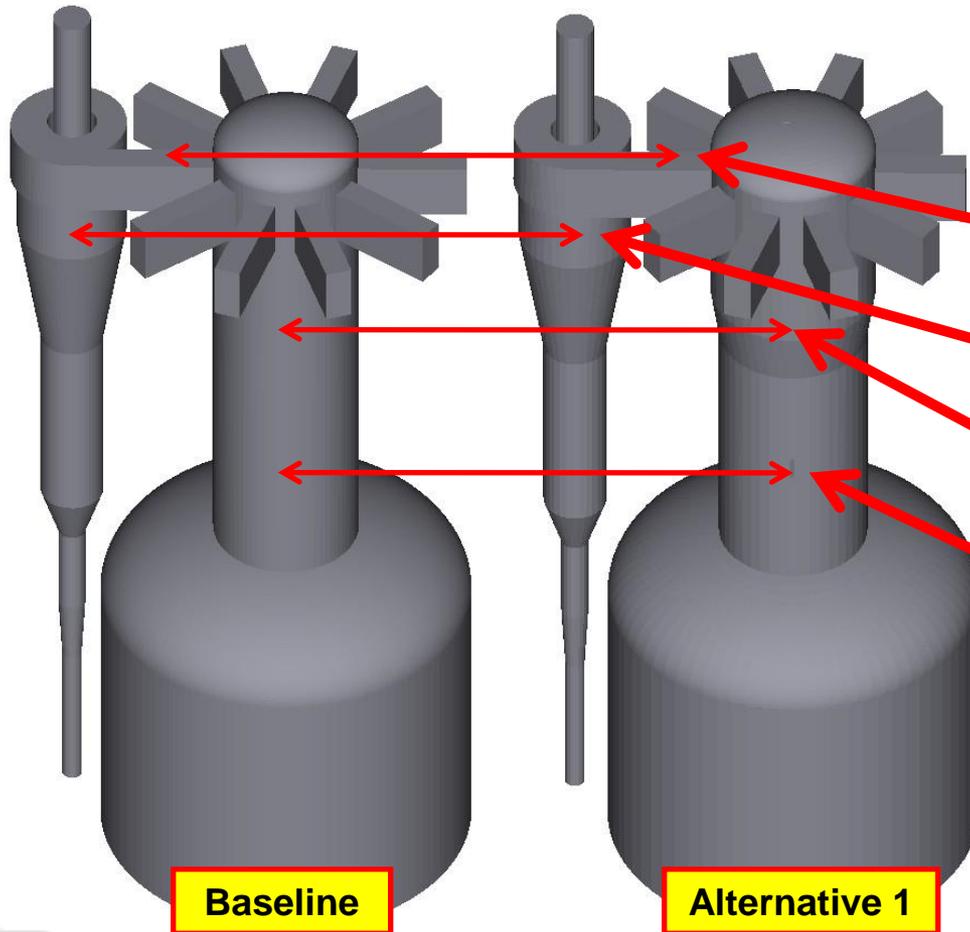


颗粒物性及边界条件

- 颗粒尺度分布如右图所示，注意这里的尺寸分布时针对通过料斗进入反应器的颗粒
- CPFDF方法采用Larange方法将颗粒处理成独立的实体，每个颗粒的尺寸随机的从颗粒尺寸曲线上获得。
- 固体物料为催化剂颗粒，密度为90 pcf (1,450 kg/m³)
- 计算采用约160W计算颗粒
- 颗粒进口流量超过100W 1b/h



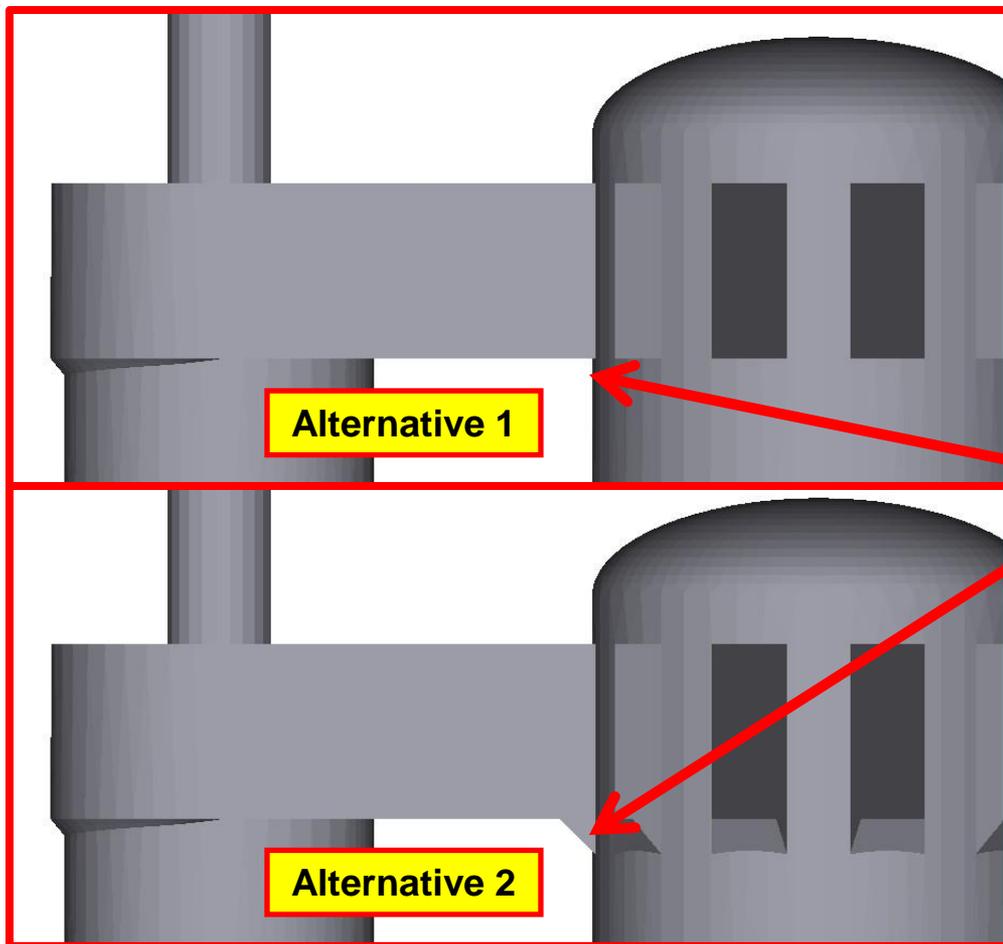
修改方案1



- 与基准设计相比，方案1的不同之处:

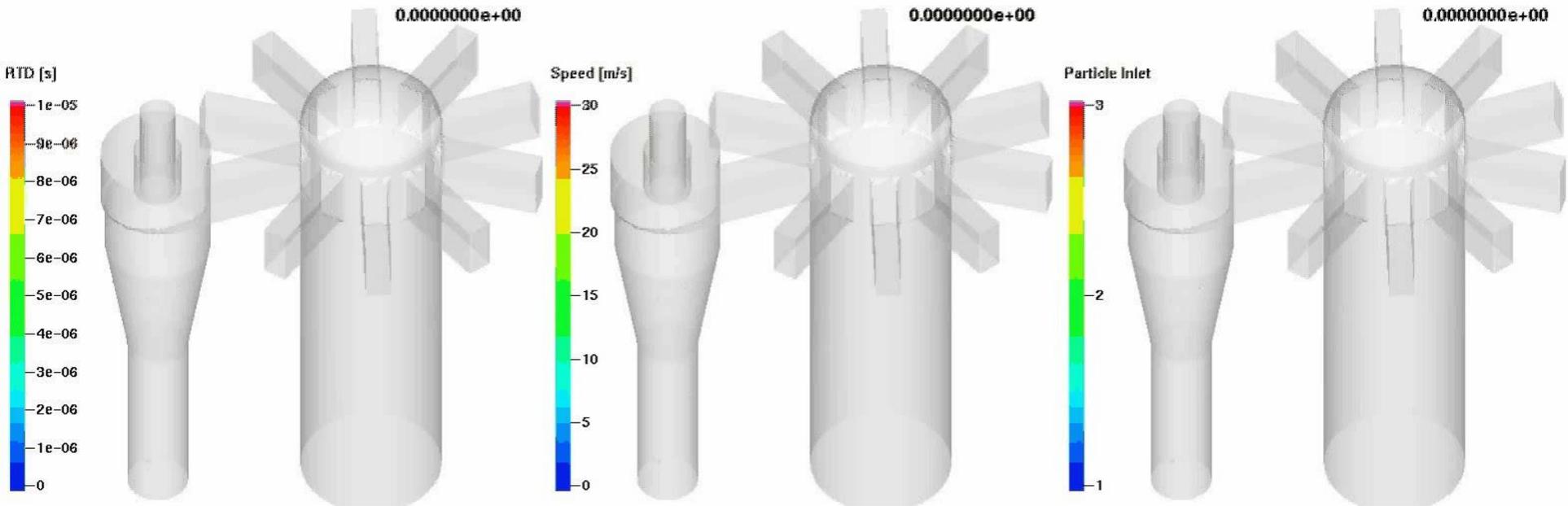
- 扩大旋风分离器入口截面
- 新的旋风分离器(尺寸略大)
- 出口提升管直径变大
- 出口提升管内安装除涡板

修改方案2

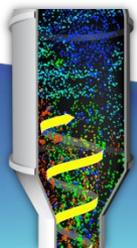


- 修改方案2的几何形状与方案1类似，但在图示的进口处做了斜角处理

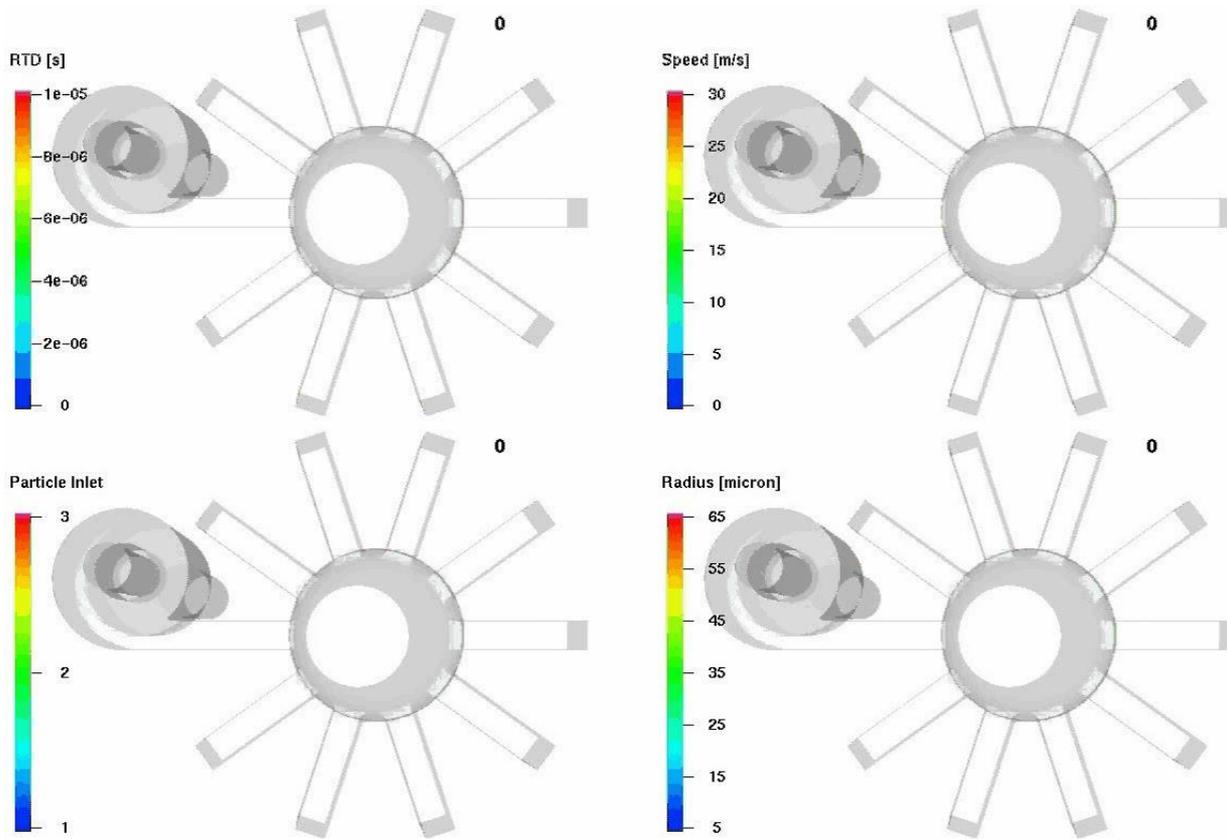
基准方案流动效果



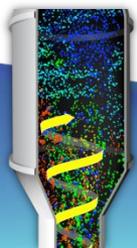
- 从左到右，动画依次展示了颗粒停留时间分布（RTD，s）
- 观察可知，颗粒流场随时间波动剧烈



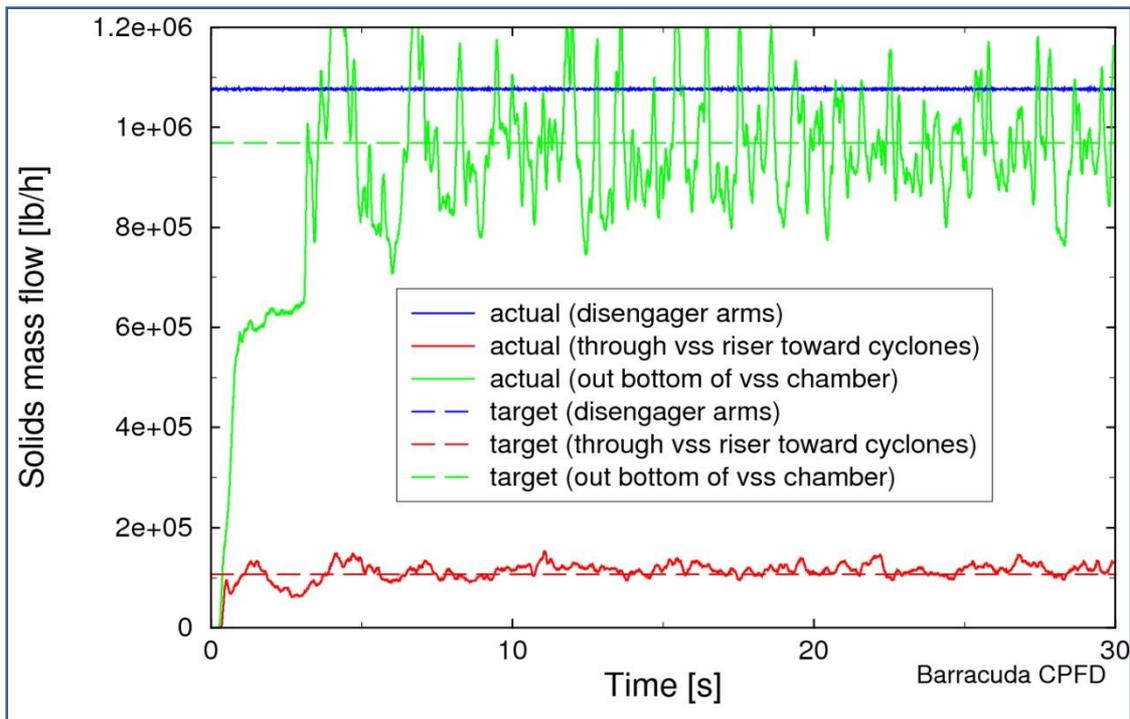
基准设计颗粒流场



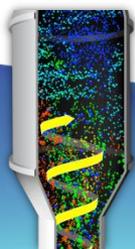
- 俯视图
- 本页ppt所示前三个动画与上页相同，第四个动画的 legend为颗粒的直径（微米）



准稳态结果

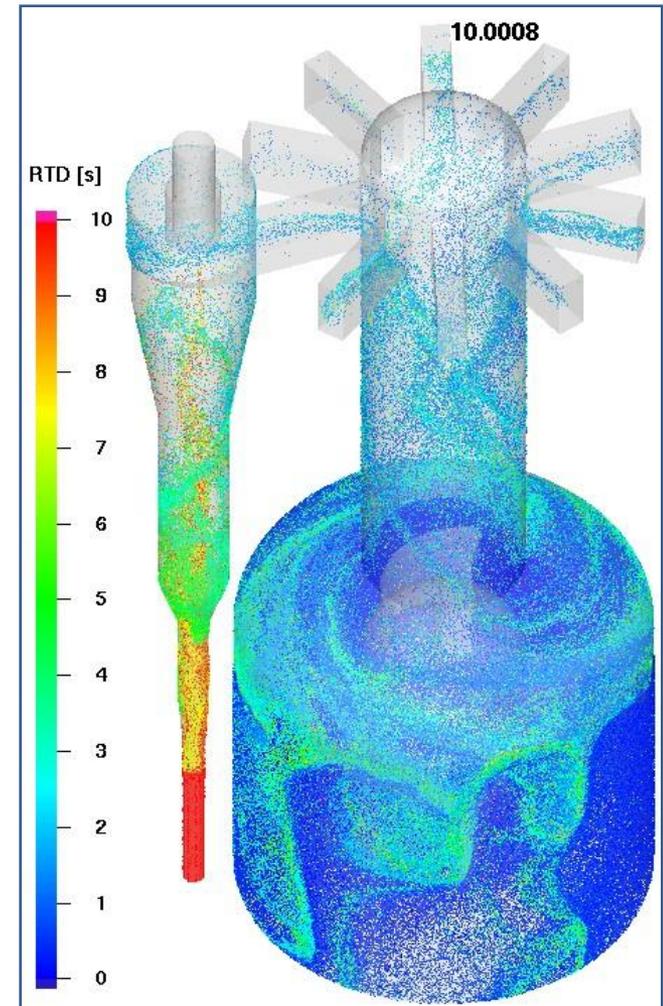


- 此图显示的为通过不同部件的颗粒质量流量随时间的变化曲线
- 约10%的颗粒向上流动，进入旋风分离器，其余的从出口空腔的下部流出。
- 流动需越5s的时间达到准稳态
- 计算10s后，打开Barracuda的磨损计算模型及并开始记录数据，做时间平均化处理



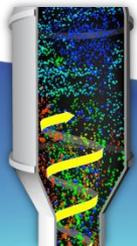
颗粒停留时间分布

- 颗粒停留时间分布显示，大部分颗粒在料斗臂进入计算域后，约1-4s后进入旋风分离器。
- 针对每个case计算30s，该时间是反应器内达到准稳态所需时间的数倍，且比关心区域内颗粒的停留时间大数倍以上，因此该时间长度对计算时间平均结果来说足够长。



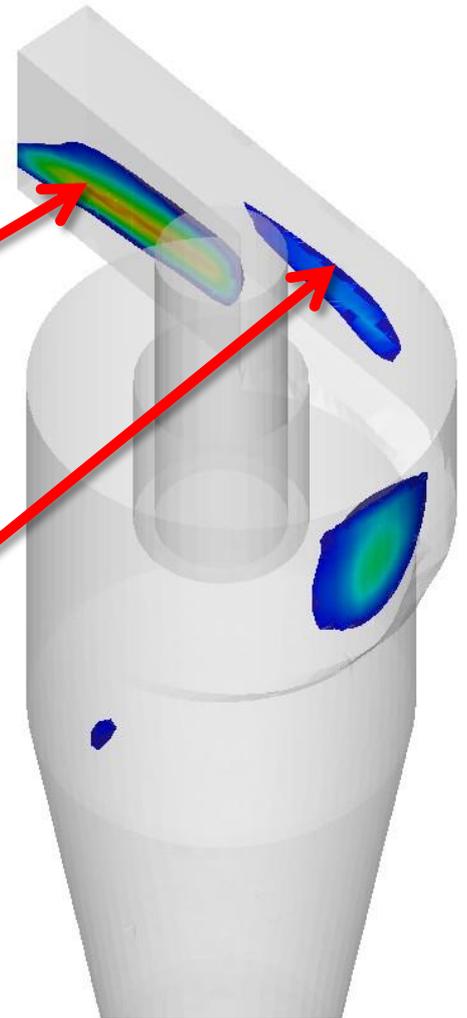
磨损

- 下面一页ppt将会标出不同模型磨蚀指标超过给定值的区域
- 需要注意的是，尽管Barracuda可以给出量化的磨蚀结果，实际装置上的磨蚀受多种因素的影响，包括：
 - 颗粒材料
 - 颗粒形状
 - 耐火材料
 - 耐火材料的安装质量
 - 工作年限等
- 因此，磨蚀指标的最佳用途是用来评价不同设计的耐磨效果，而非用来严格的量化改进效果。

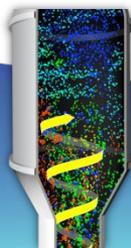
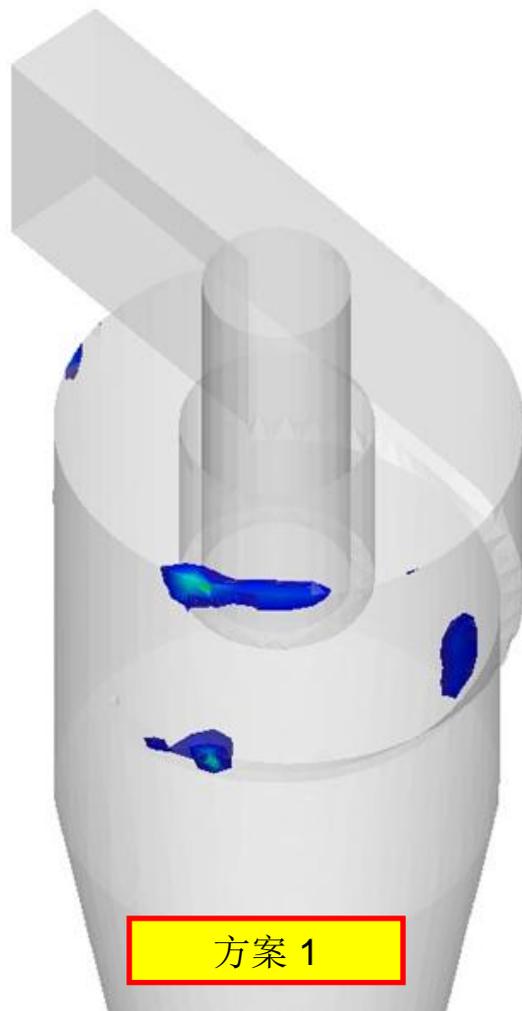
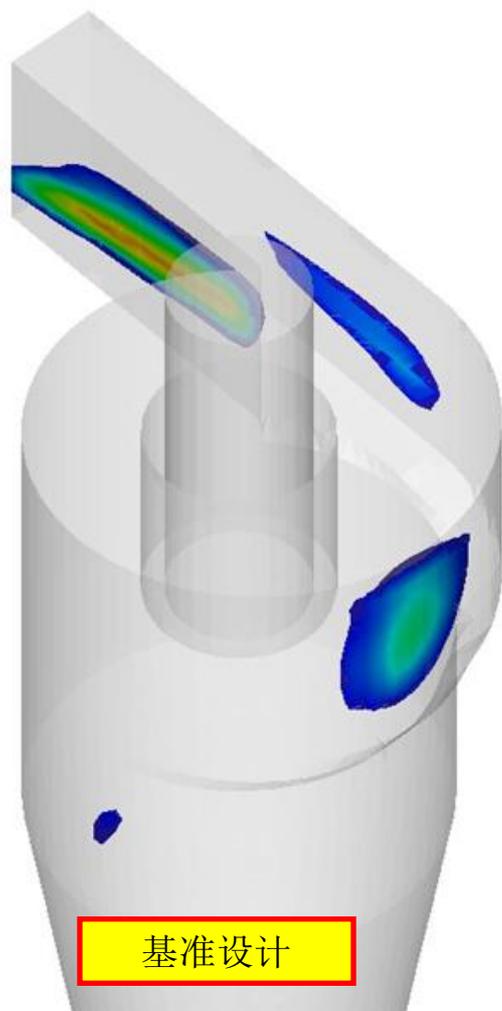


磨损—模拟与现场实测结果比较

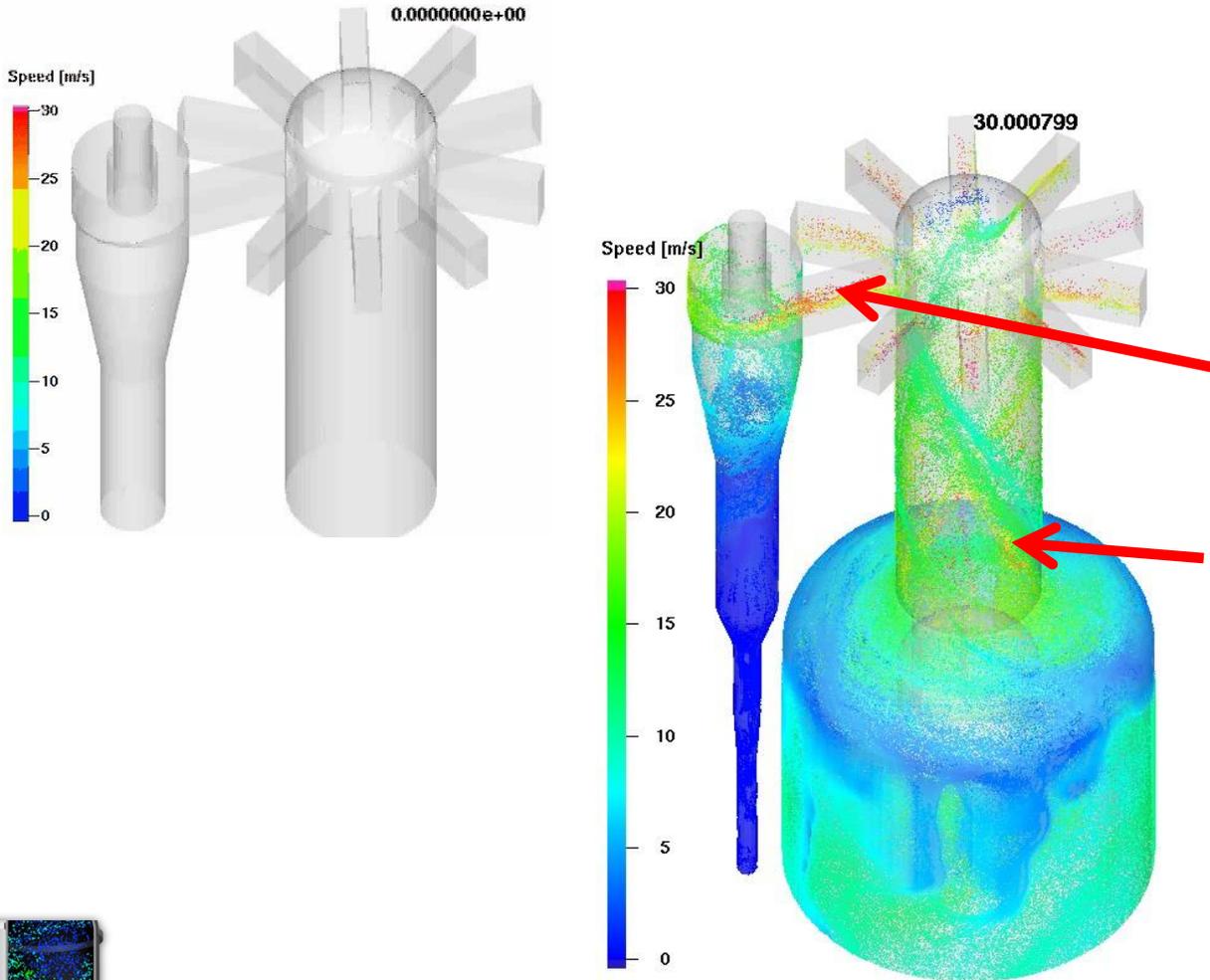
- 磨损计算结果与历史检修报告结果吻合。



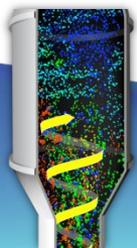
磨损—不同设计方案的磨损比较



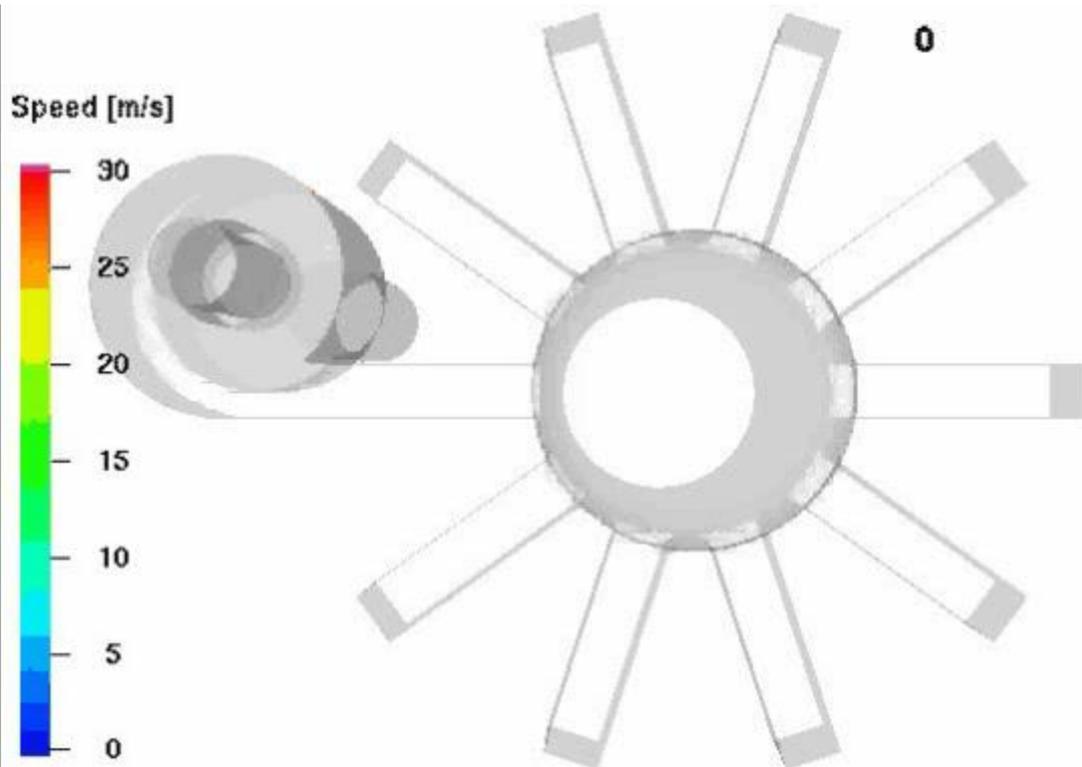
颗粒速度分布



- 旋风分离器入口处，颗粒速度最大
- 出口提升管内也有部分区域颗粒速度很大

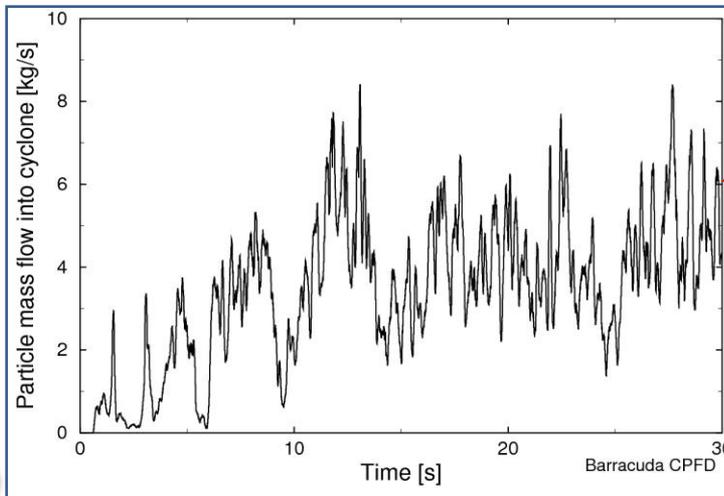
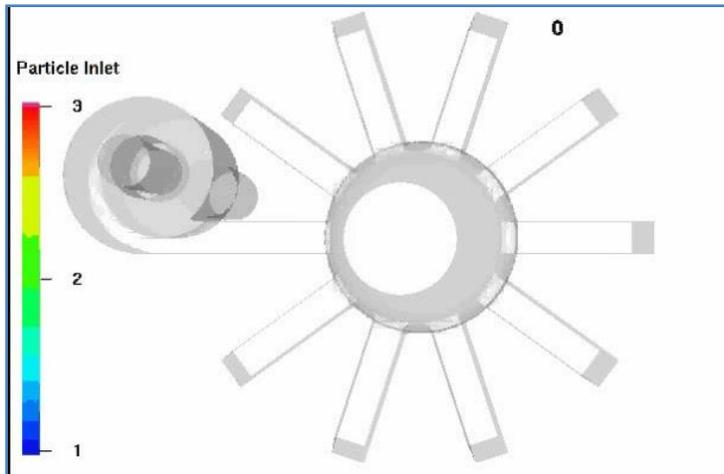


颗粒速度分布



- 俯视图显示，提升器内高速颗粒主要在中心位置，周围颗粒速度相对较低，沿着壁面旋转向上流动。

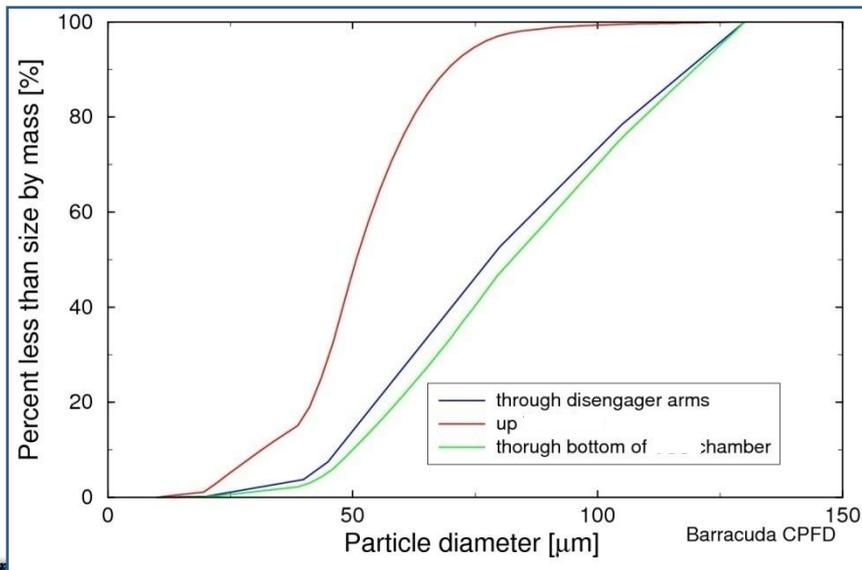
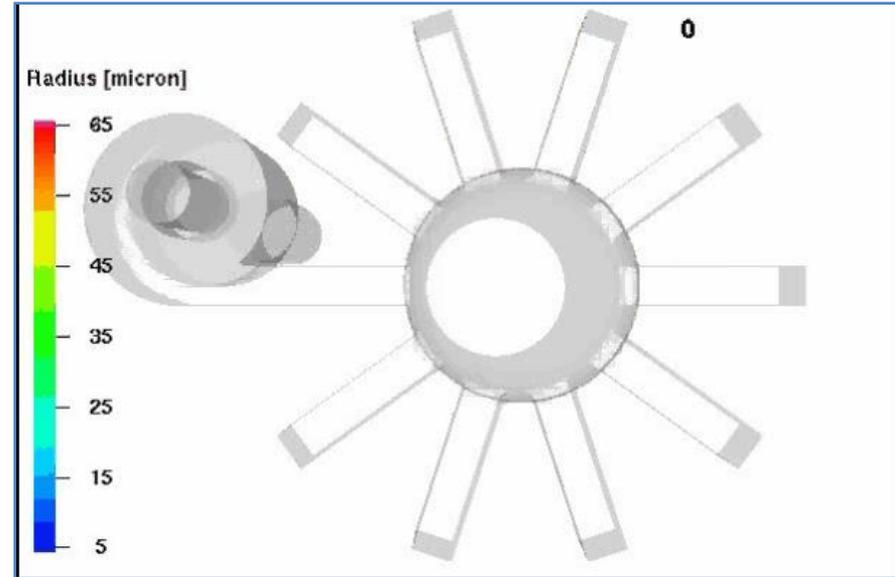
旋风分离器进料量



- 旋风分离器的颗粒进料量随时间波动
- 进入旋风分离器的颗粒质量流量随时间变化如图所示

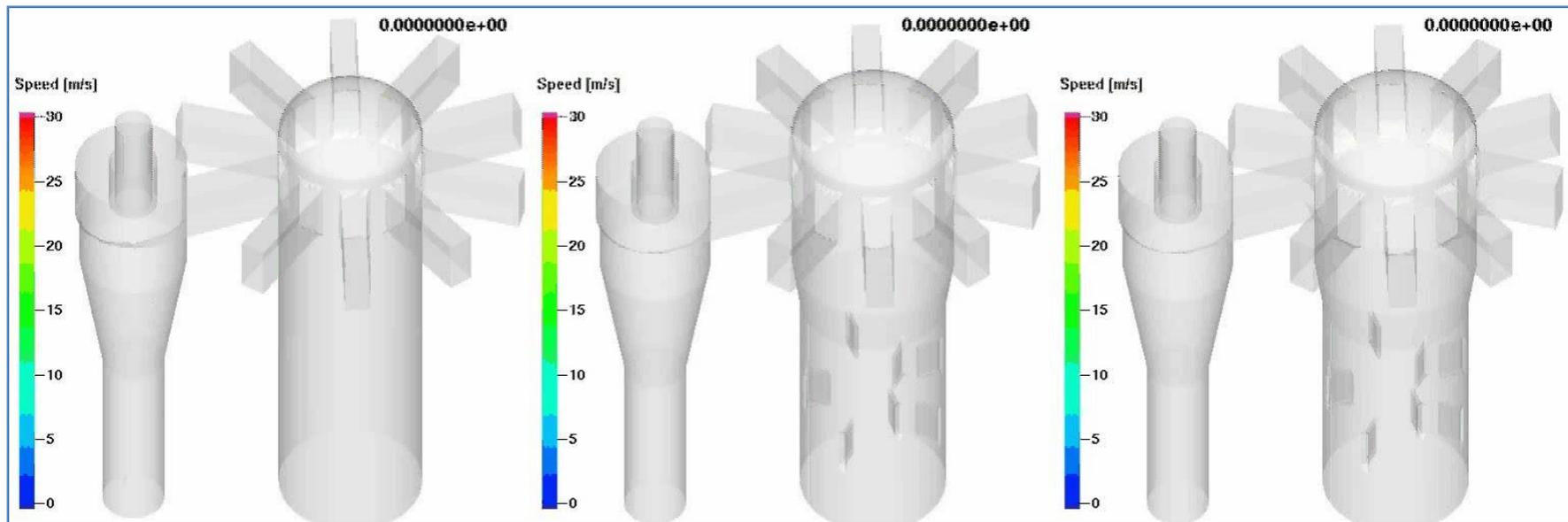
进入旋风分离器的颗粒直径分布

- 注意，进入旋风分离器的颗粒主要为细颗粒



修改方案对总体流动的影响

- 修改后的设计方案与基准方案相比，总体流场变化不明显
- 可观察到的一些变化如下：
 - 旋风分离器入口处流速降低
 - 提升器内，颗粒流线发生变化（稳流器的作用）



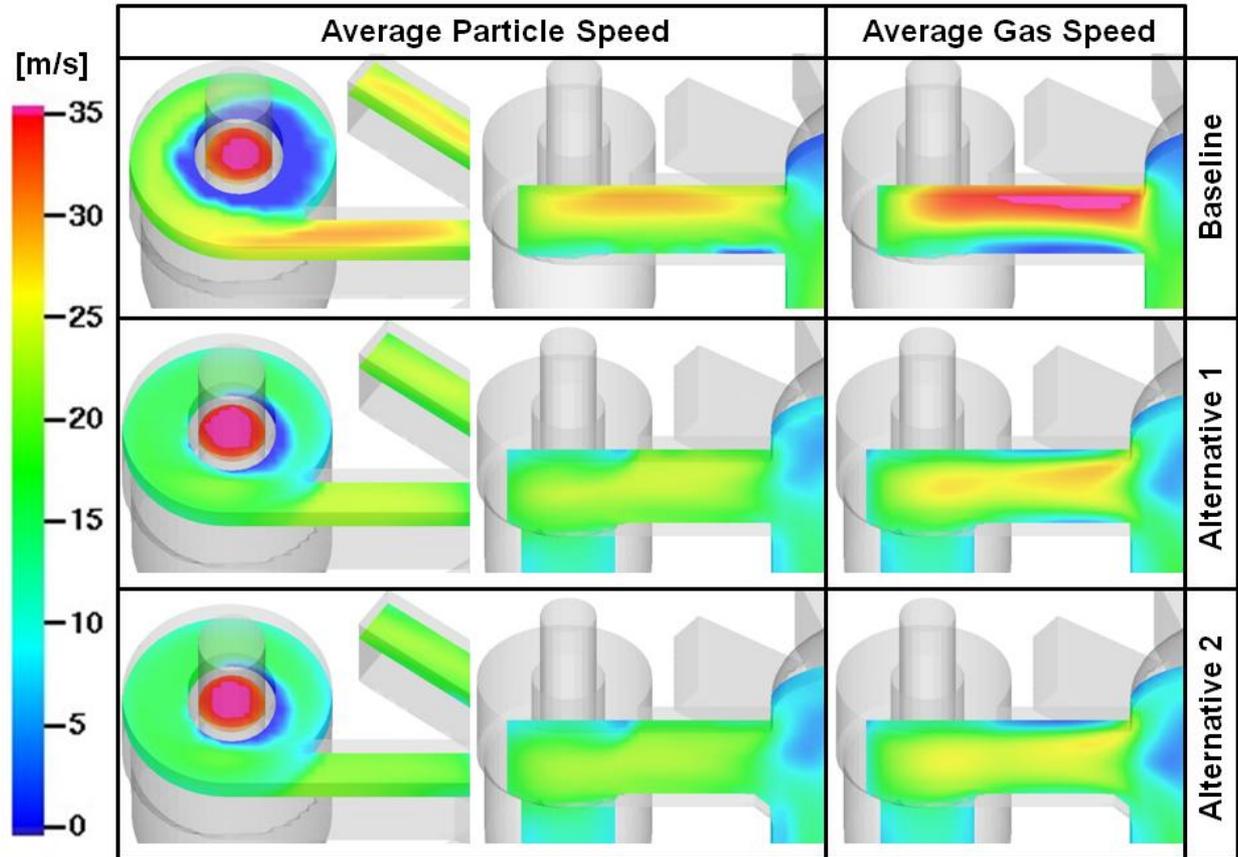
基准设计

方案1

方案2

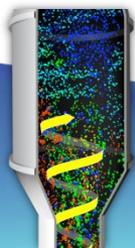
修改方案对气体及颗粒速度的影响

- 修改方案降低了气体的最大速度，从而减轻了磨蚀，同时降低了旋风分离器的流动分层现象。

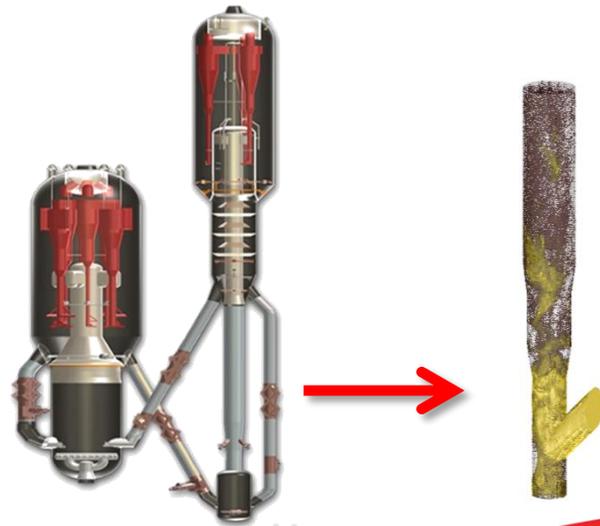


结论

- CPMFD模型可用来计算出口提升管及旋风分离器内的3D、瞬态多相流动。
- 颗粒流动在流进旋风分离器的部分存在剧烈的波动。
- 颗粒流动倾向与流向旋风分离器的中心，从而导致旋风分离器的分离效率降低，并导致大量细小颗粒的损失。
- 与基准设计方案相比，所提出的两个修改方案均能降低磨蚀。
- 两种修改方案均有相似的抗磨蚀性能，但方案2效果略佳。
- 用户还可以采用Barracuda软件来评价修改方案对操作单元性能的影响。（未在本ppt里展示）



案例2: Barracuda在FCC提升装置中汽油生产 中的应用



BARRACUDA VR®

www.cpdf-software.com

SIMULATE > UNDERSTAND > OPTIMIZE

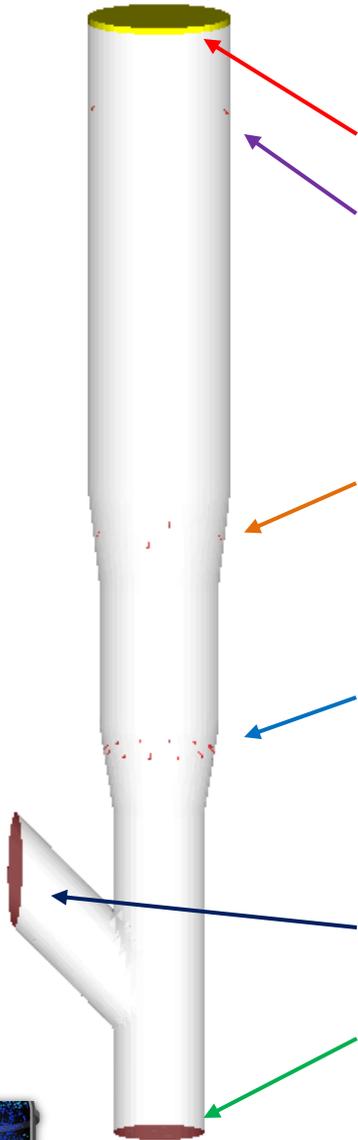
cpfd COMPUTATIONAL
PARTICLE
FLUID DYNAMICS

主要内容

- Barracuda用于FCC提升装置中三维流动、传热及反应过程模拟
- 重质碳氢化合在催化剂表面进行催化裂化生产汽油
- 催化剂表面因焦炭沉积而失活过程的模拟
- 催化剂的停留时间对产率的影响



边界条件



- 提升管出口- 出口压力保持恒定: **166.7 kPa.**
- 回流浆液: 回流浆液通过提升管顶部附近的2个喷嘴进入;
质量流量: 0.84 kg/s ; 流 速: 0.06 m/s,; 温 度: 364.9 K.
回流浆液假设为全为油气成分, 进液喷嘴位于距离提升管底部19.3m的位置, 且与提升管呈斜向上60度的倾角。
- **MTC** -油气通过4个混合温度控制 (MTC) 喷嘴喷入;
质量流率: 21.78 kg/s, 流速: 1 m/s, 温度: 364.9 K.
MTC 喷嘴位于距离提升管底部11.25m的位置, 与提升管呈60度的倾角。
- 进料油-油气通过12个喷嘴喷入;
质量流率: 232.8 kg/s, 流速: 73.2 m/s, 温度: 491.9 K.
油气给料由93.5% (wt) 油气和 6.5% (wt) 的蒸汽组成; 进料喷嘴位于距离提升管底部7.221m的位置, 与提升管成45度的倾角。
- 再生催化剂 - **质量流率: 1740 kg/s , 温度: 973 K.**
催化剂由流率为 0.5 kg/s 的蒸汽输送。
- 底部蒸汽- 蒸汽从提升管底部进入;
质量流率: 0.82 kg/s ; 温度: 633 K.

催化剂性质

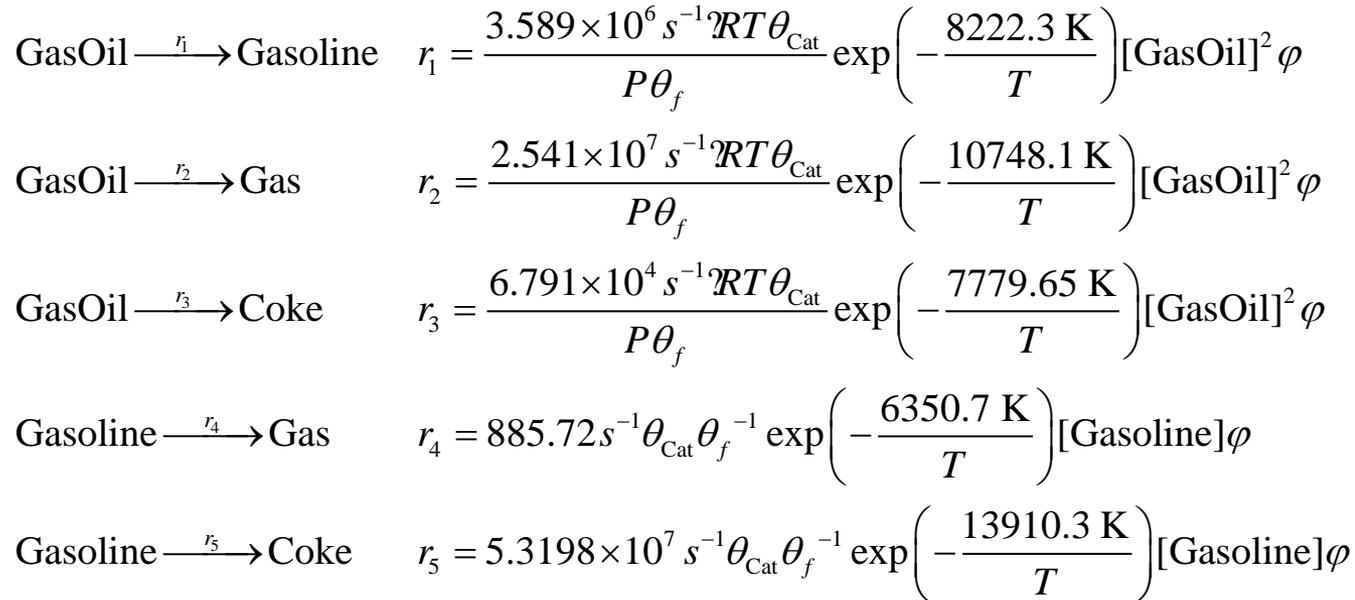
- 催化剂密度– 1620 kg/m³
- 催化剂粒径– 40 微米
- 催化剂表面初始沉积焦炭量– 0.1 wt%
- 热容– 1150 J/kg/K
- 颗粒曳力模型– 基于Yang等（2003）的EMMS模型

Yang, N., Wang, W., Ge, W., and Li, J. (2003). CFD simulation of concurrent-up gas-solid flow in circulating fluidized beds with structure-dependent drag coefficient. *Chemical Engineering Journal*. 96: 71-80.

模拟启动阶段，
催化剂入口

化学反应

采用集总模型作为裂化反应动力学模型，动力学方程根据Nayak 等(2005)的动力学进行简化。四集总模型假定系统中存在4种碳氢化合物的集总组分，分别为：油气组分、汽油组分、气体组分和焦炭组分。



其中 φ 表示催化剂失活函数(详见下页)

Nayak, S., Joshi, S., and Ranade, V. (2005). Modeling of vaporization and cracking of liquid oil injected in a gas-solid riser. *Chemical Engineering Science*. 60: 6049-6066.

催化剂失活函数

催化剂失活函数表达式如下:

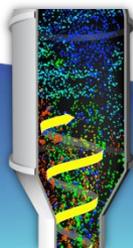
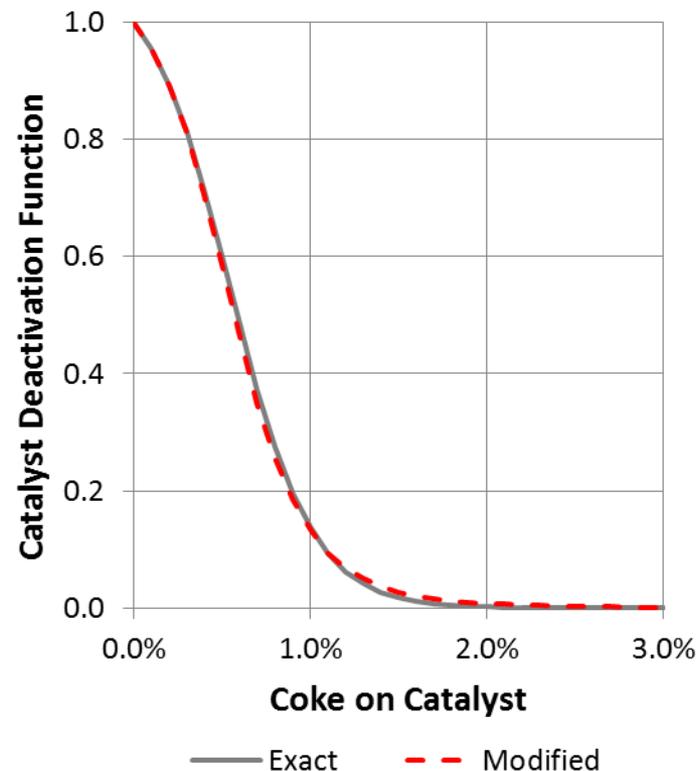


其中 w_C 表示催化剂表面焦炭的质量分数，
Barracuda VR 16 中使用该函数时，对函数进行
五阶泰勒展开；并对展开式的各阶系数进行修正
，使得修正后的表达式满足如下条件：

$$\int_0^1 \varphi dw_C = \int_0^1 \varphi_{\text{modified}} dw_C$$

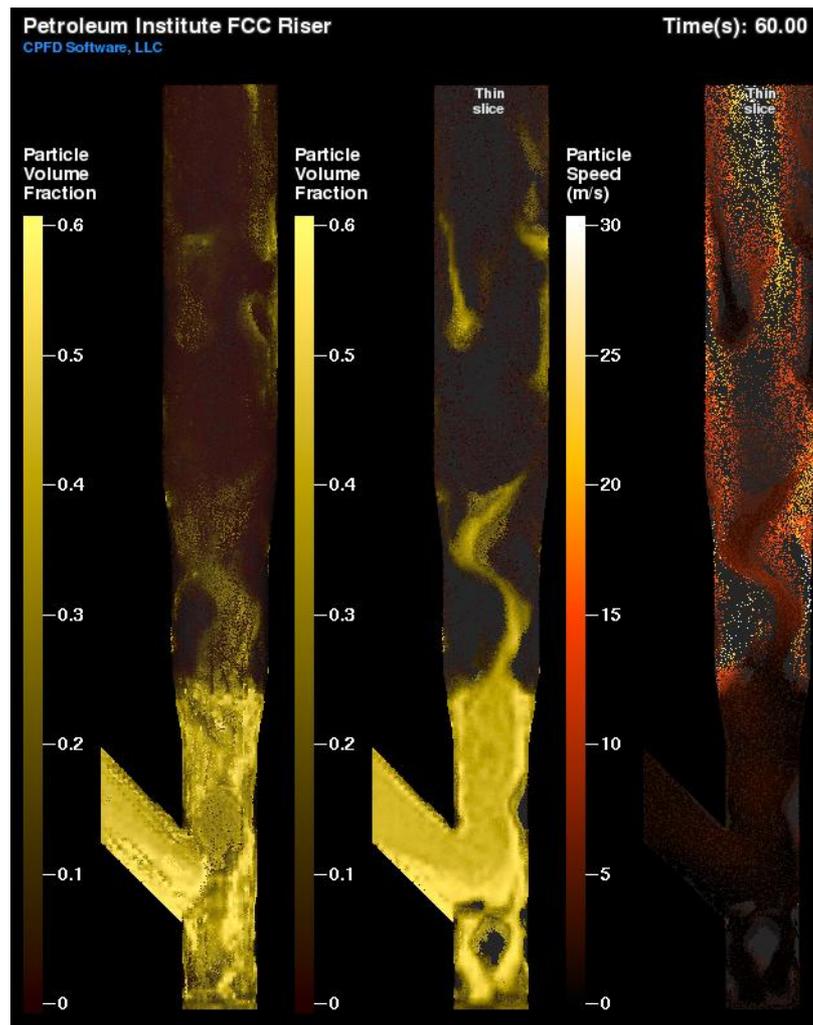
修正后的催化剂失活函数表式如下：

$$\varphi_{\text{modified}} = \frac{11.4}{11.4 + 429w_C + 92020.5w_C^2 + 1.31589 \times 10^7 w_C^3 + 1.41129 \times 10^9 w_C^4 + 3.405 \times 10^{11} w_C^5}$$



提升管中的颗粒流动

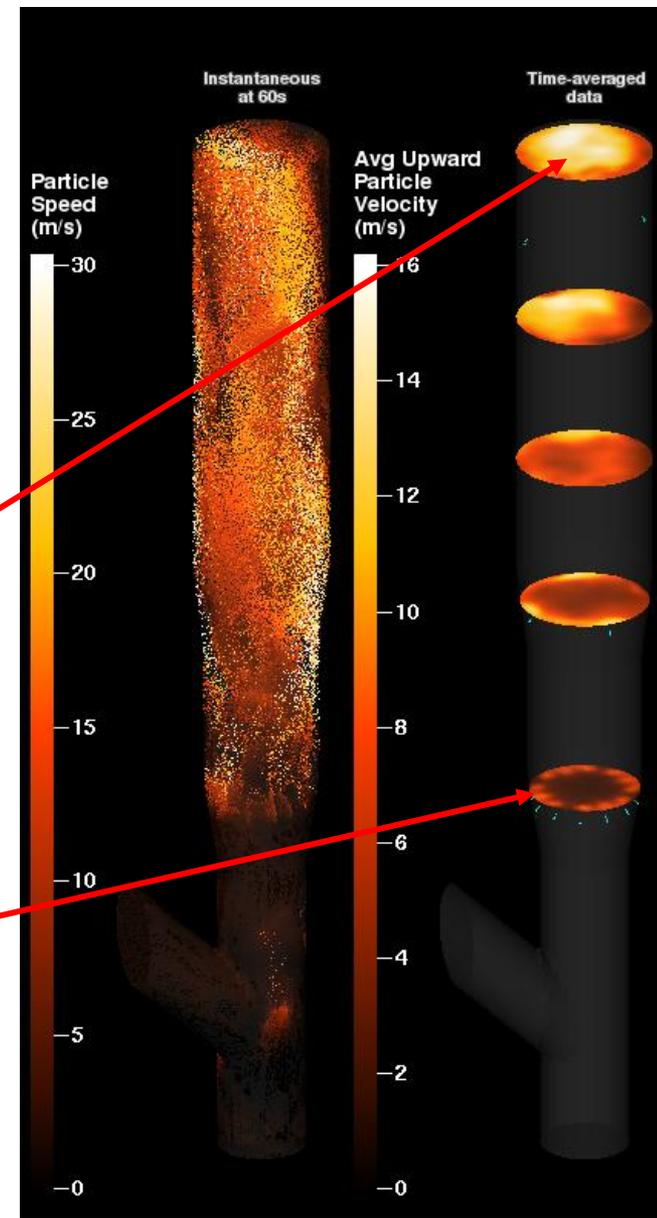
- 动画所示为提升管中颗粒与气体的运动情况；
- 左图：整个提升管中颗粒体积分数的分布；
- 中图：提升管中心剖面颗粒体积分数的分布；
- 右图：提升管中心剖面颗粒的速度分布。
- 提升管中颗粒输送包括：
 - 高速稀相输送和
 - 低速颗粒团输送



时均颗粒速度

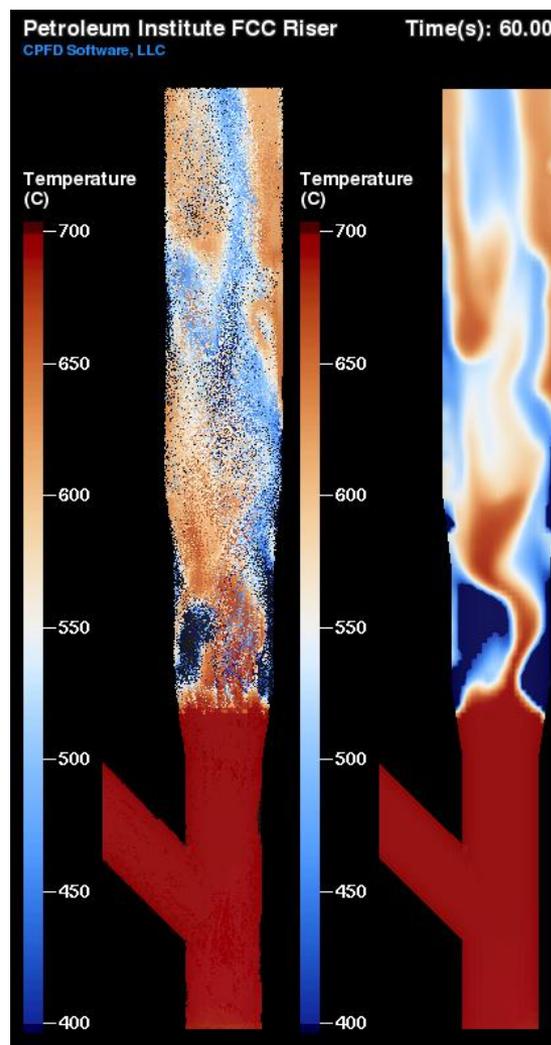
如图所示为颗粒的时均速度分布图：

- 提升管顶部区域的中心位置为高速颗粒流动区 (经典的中心环流)
- 进口附近颗粒速度较高



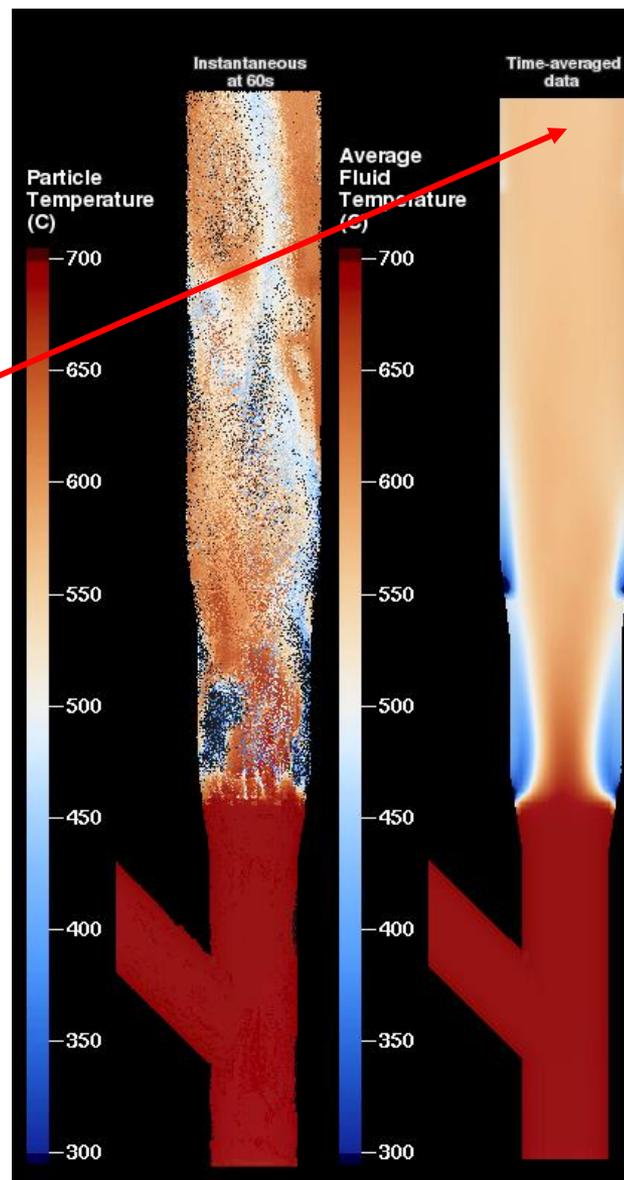
提升管内温度

- 动画所示为提升管内颗粒与流体的温度分布：
 - 三维提升管内颗粒的温度分布（左）
 - 提升管中心剖面上流体的温度分布（右）
- 管内温度是冷却气体给料量、热颗粒给料量及化学反应热的函数
- 相较于稀相颗粒区域，密相颗粒团区域温度较高。

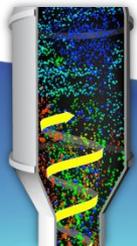
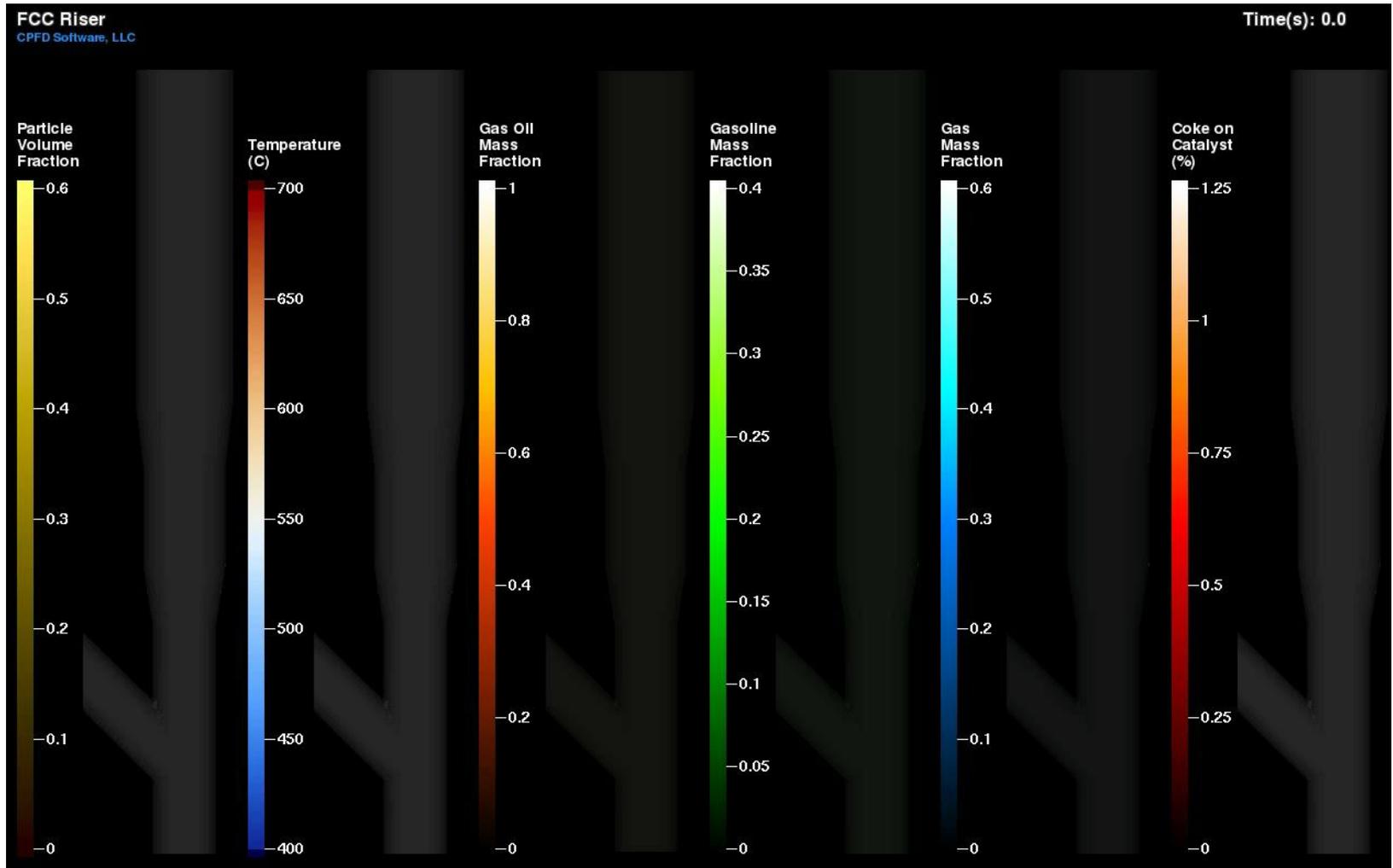


时均气相温度

- 右图所示为沿中心线方向的时均流体温度。
- 出口处流体的平均温度为575 °C；
- 与文献报道值550 °C较一致。

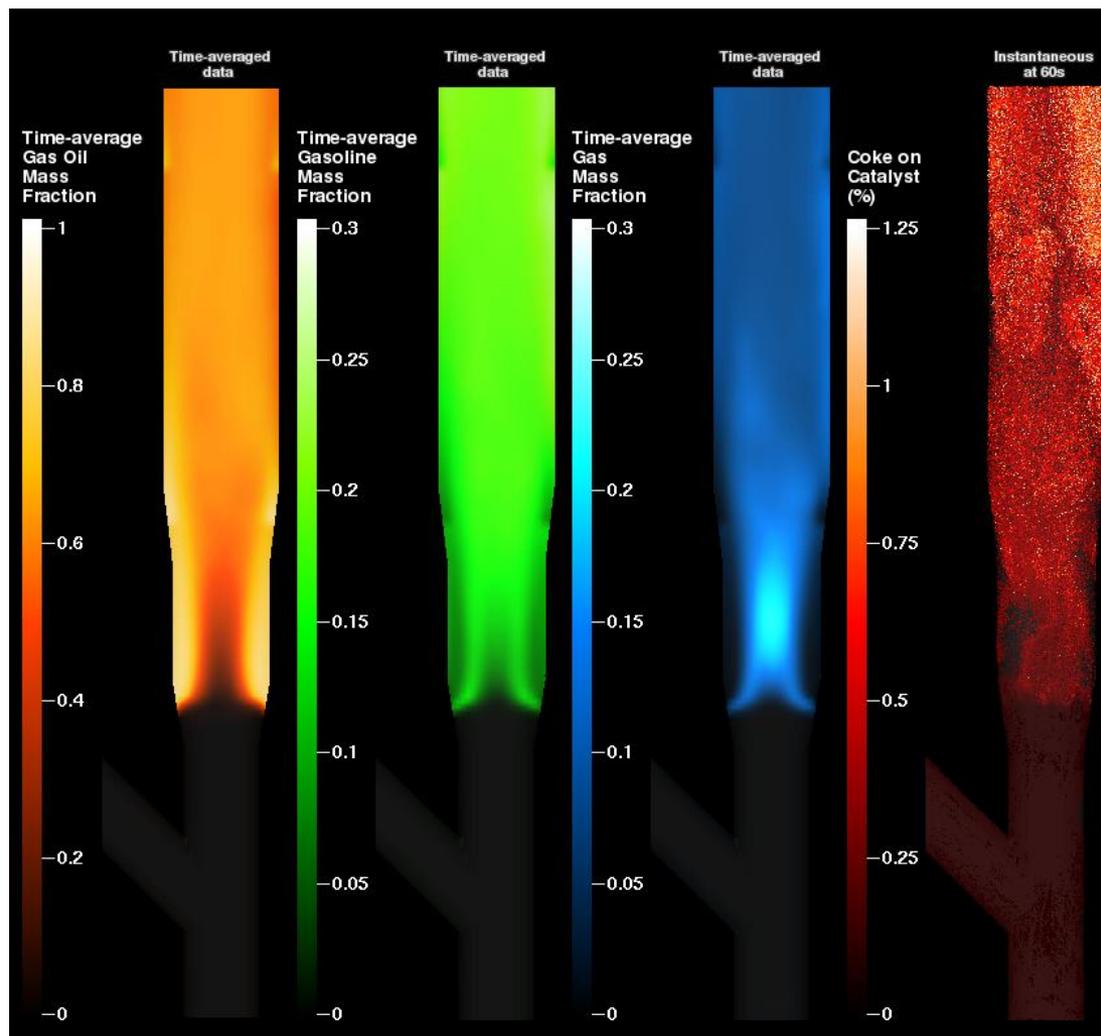


提升管内的气固组分



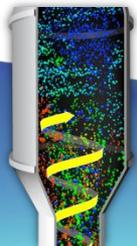
气体的平均组成

- 模型中所预测的提升管出口处的平均组成：
 - 油气: 51.5 wt%
 - 汽油: 23 wt%
 - 气体: 16 wt%
 - 水: 9.5%
- 催化剂表面的焦炭质量分数: 0.75% — 1.25%

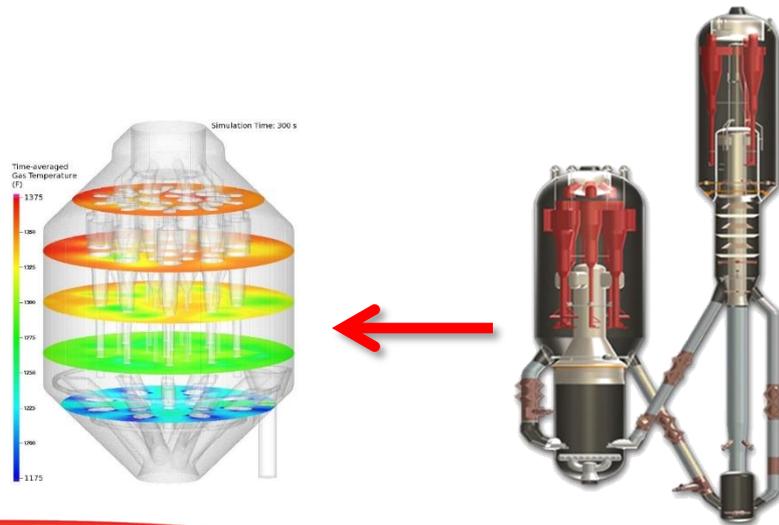


结论

- 模型所示为Barracuda中四集总FCC反应器模型在FCC提升装置中的应用；
- 由模拟结果可知：
 - 提升管中颗粒与流体的运动情况
 - 颗粒和流体的温度
 - 气相的组成
 - 催化剂表面的焦炭沉积量
- 可采用更为复杂的反应模型进行模拟；
- 可通过计算机模拟得到单元设计、流速、工艺条件等因素对反应的影响。

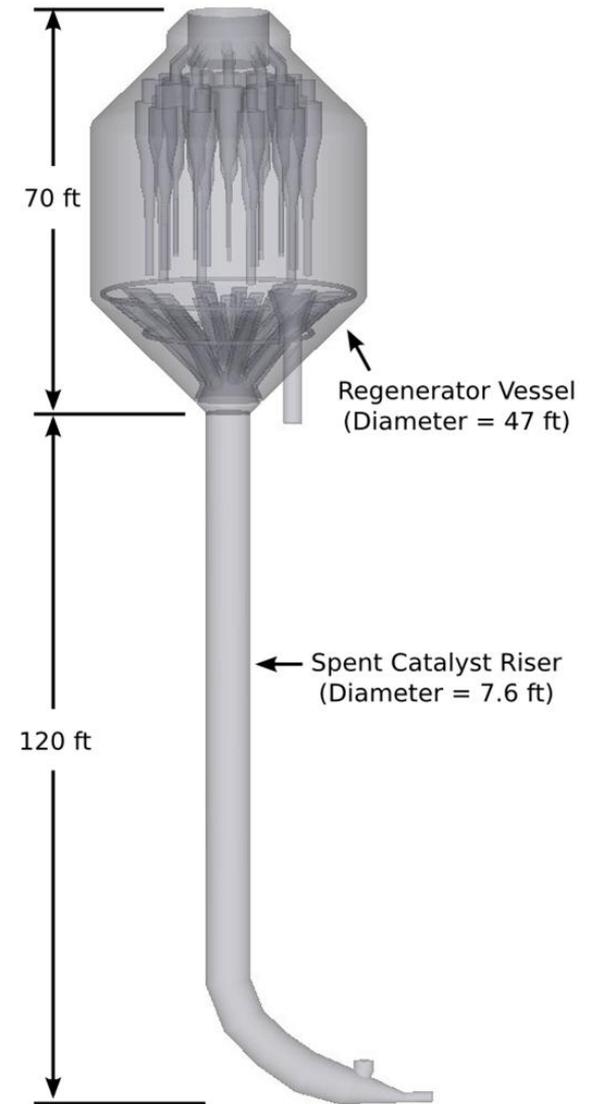


案例3： FCC再生器后燃室的研究



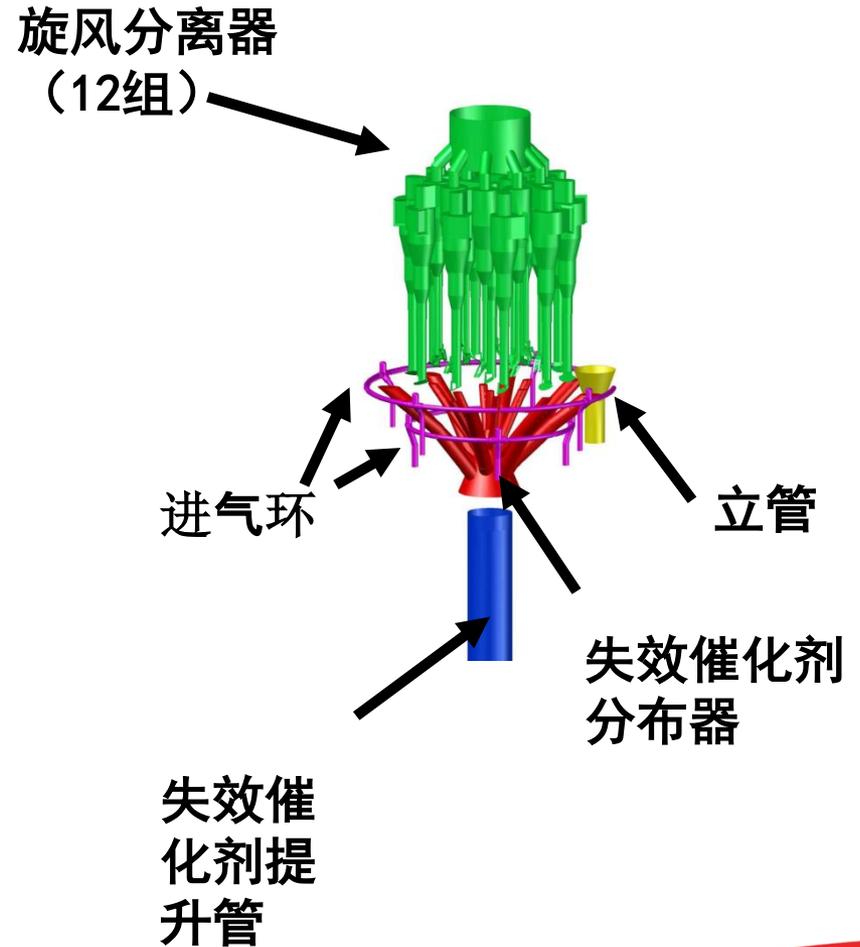
技术目标

- 美国一个炼油厂中再生器的后燃问题 (~100°F)
- 使用CFD模型模拟的目的:
 - 探究引起后燃问题的根本原因
 - 探究降低后燃的技术方法
 - 作为SO_x 和NO_x 减排研究的基础



技术难点

- 几何结构复杂：
 - 容器含有内构件
 - 长度尺度范围宽
- 系统中同时存在多相的传热与反应
 - 后燃(传热)
 - 烟气排放 (反应)
 - 多相及多组分系统
- 边界条件及初始条件：
 - 模型的适用范围
 - 通过立管进行颗粒的回收
 - 初始条件
 - 温度、颗粒组分等
 - 焦炭组成参数



模型组成

- 再生器问题可分为三个模型加以讨论：

模型1：失效催化剂提升管

- 催化剂分布器的边界条件

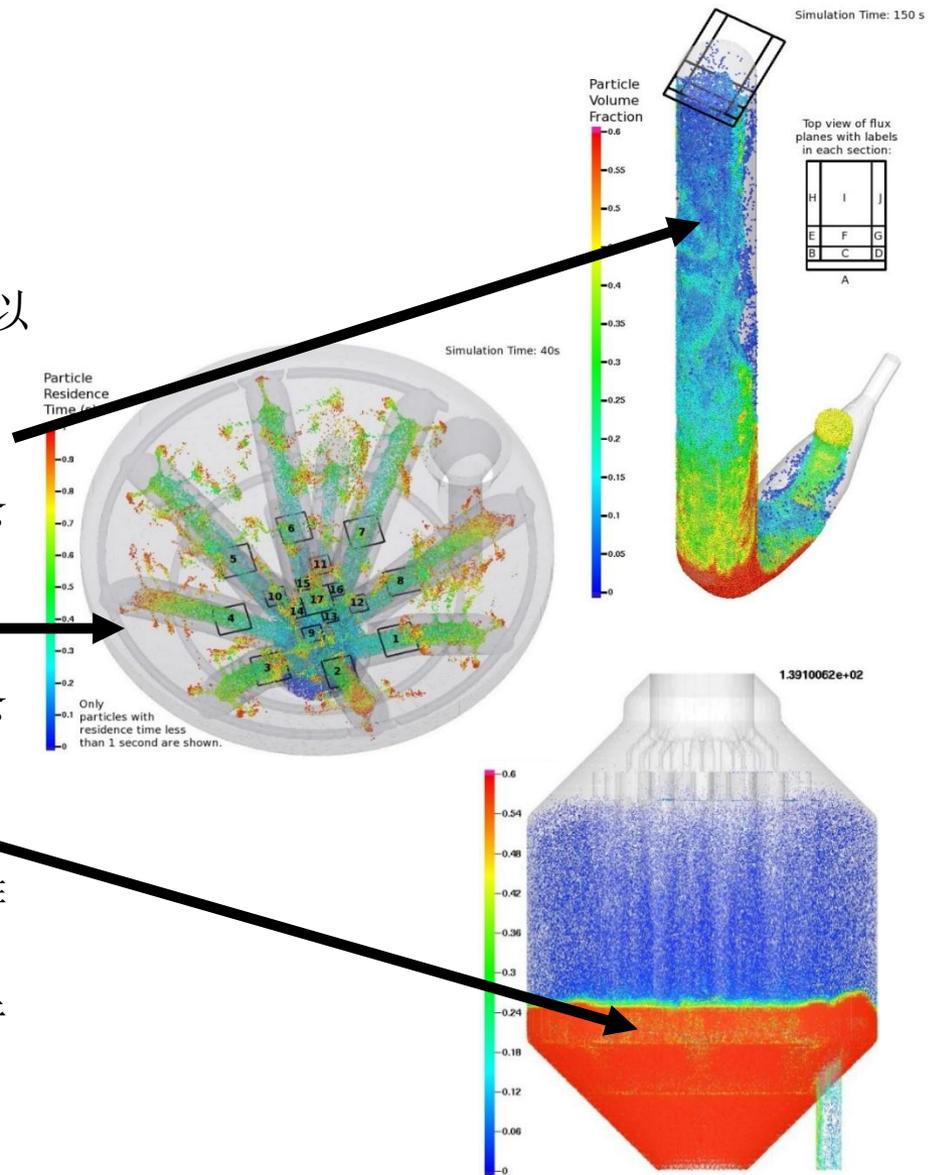
模型2：分布器料斗臂

- 为获得再生器的边界条件

模型3：再生器

- 旨在解决后燃和烟气排放问题

- 所有模型均采用Barracuda进行计算。



模型 1 — 待生催化剂提升管

← Top Pressure
Boundary Condition

- 目的: 获得催化剂分布器模型的边界条件
 - 气体与颗粒的空间分布
 - 是否存在粒度偏析
- 模型假设: 等温、无反应
- 模拟结果:
 - 催化剂颗粒不存在粒度偏析
 - 提升管顶部出口的气体 and 固体颗粒的质量流
量分布不均匀
 - 边壁附近: $275 \text{ kg/m}^2/\text{s}$ (固体), $9.4 \text{ kg/m}^2/\text{s}$ (气体)
 - 中心区域: $170 \text{ kg/m}^2/\text{s}$ (固体), $17 \text{ kg/m}^2/\text{s}$ (气体)

Spent Catalyst Inlet
Flow Boundary
Condition

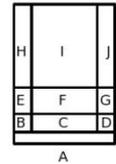
Lift Air Flow
Boundary
Condition

Time-average
Particle
Volume
Fraction

Particle
Volume
Fraction

Simulation Time: 150 s

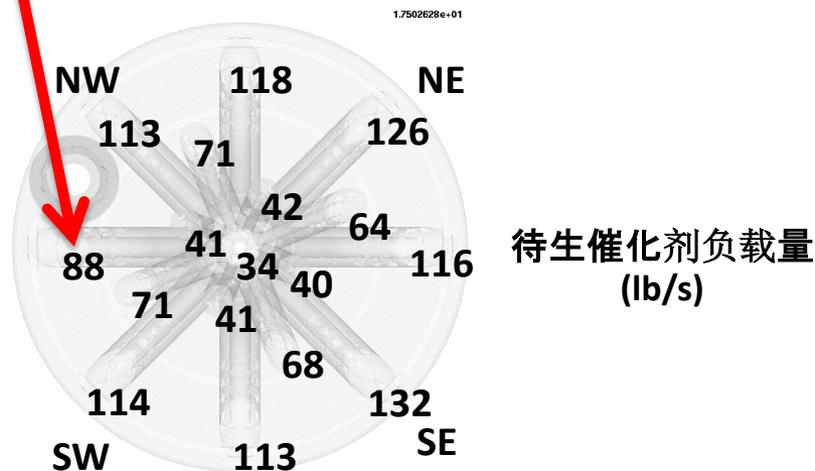
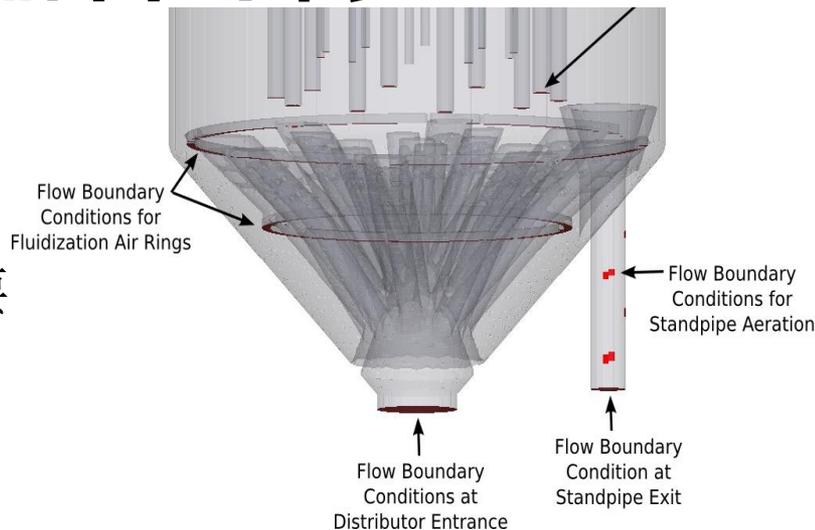
Top view of flux
planes with labels
in each section:



2.0000093e+02

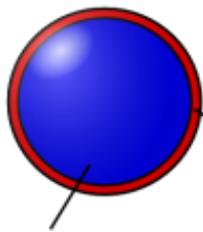
模型2—分布器料斗臂

- 目的: 获得再生器模型的边界条件
- 假定: 传热 + 反应
- 难点: 分布器臂中的孔通道计算需要较密的网格
- 结论: 待生催化剂分布器性能良好
 - 靠近再生立管侧的催化剂负载量稍低
 - 满足待生催化剂提升管要求



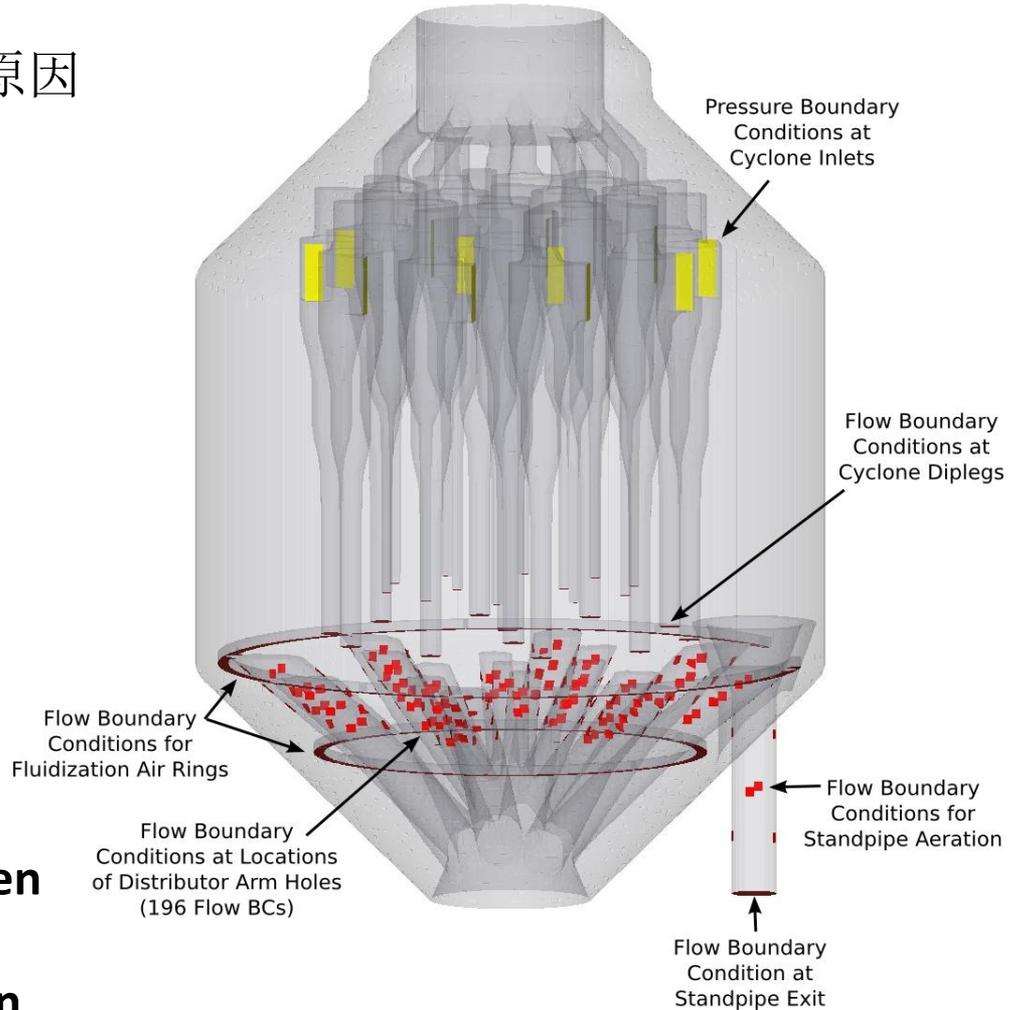
模型3 — 再生器

- 目的: 探究引起后燃的根本原因
- 假设: 传热 + 反应
- 难点: 颗粒的离散性
 - 粒径分布 (PSD)
 - 多组分系统
 - 温度等。



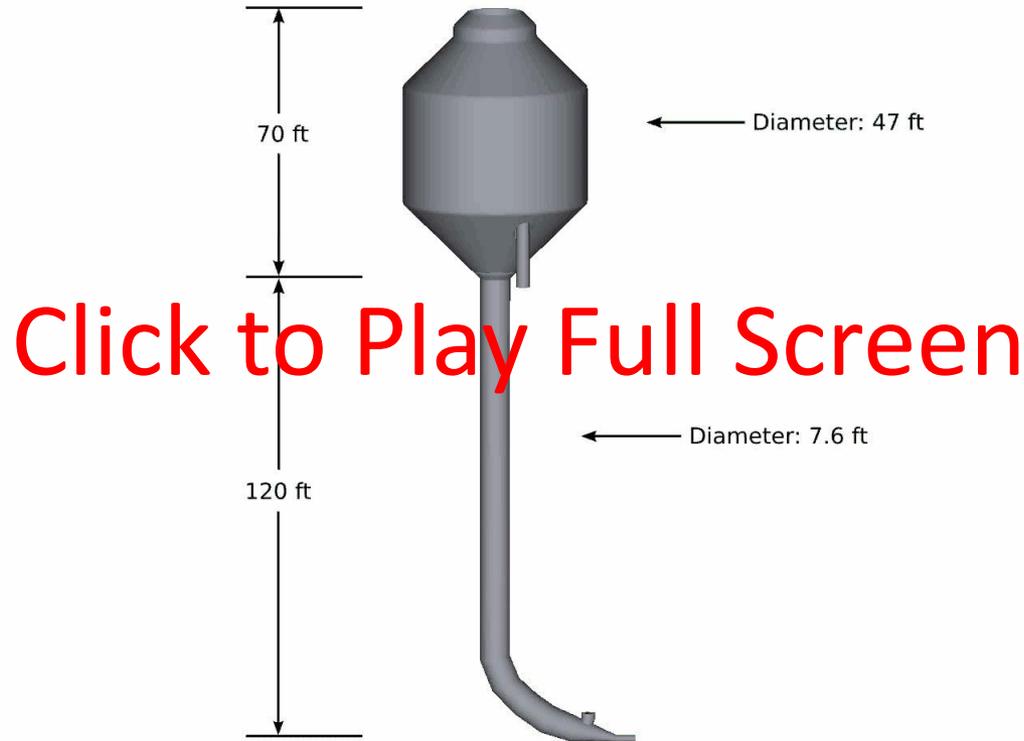
Coke:
0.6048% carbon
0.0299% hydrogen
0.0003% sulfur
0.0386% nitrogen

Catalyst 99.3264%



结果一动画

Commercial FCC Regenerator Simulation

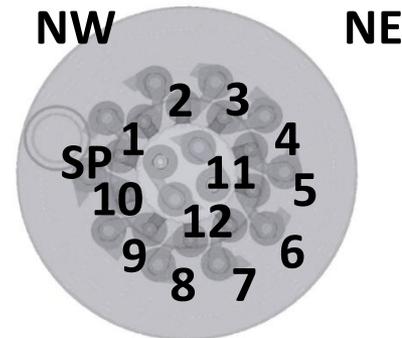
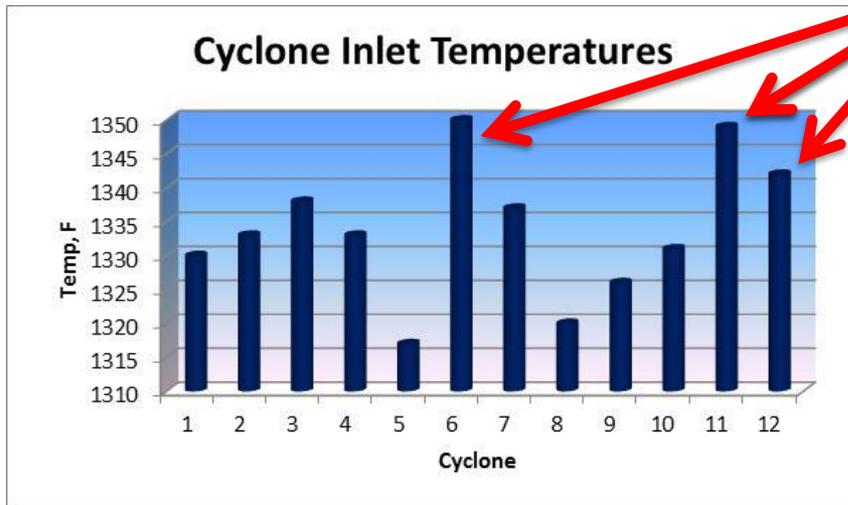
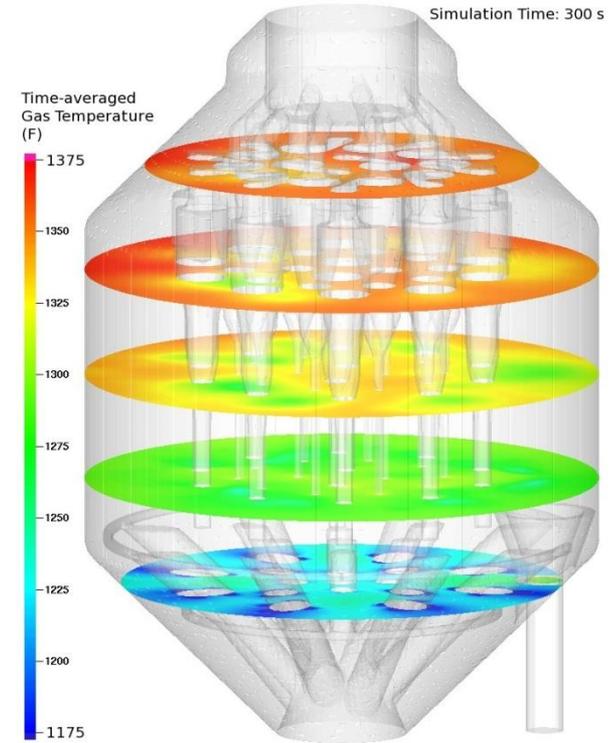


Combined Geometry: Spent Cat Riser + Regenerator



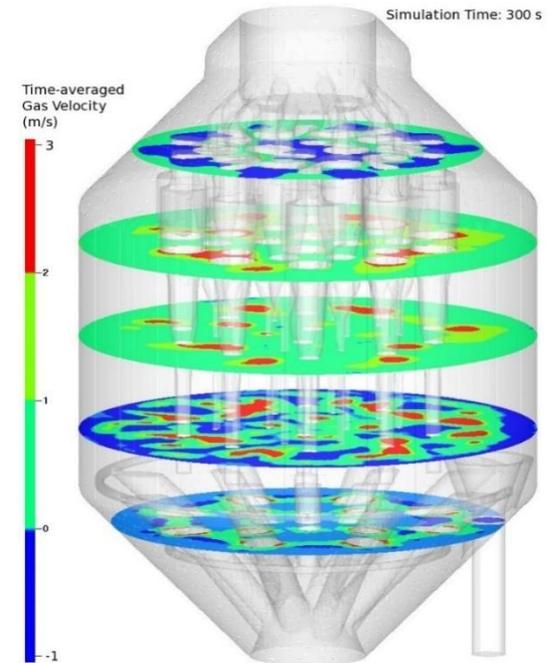
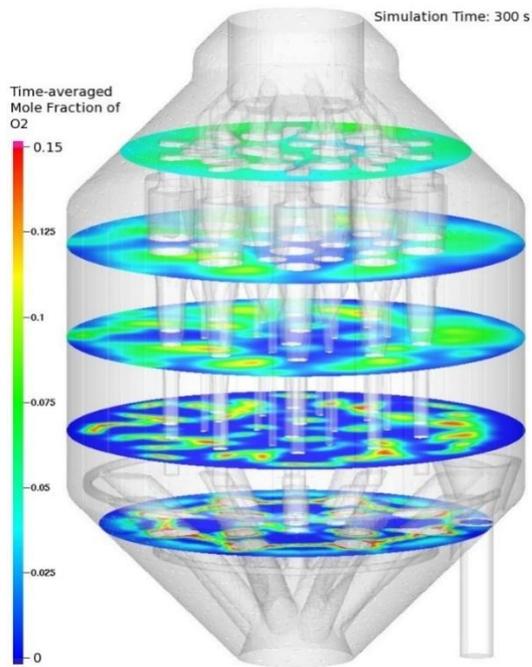
结果—后燃

- 模型可准确预测再生器后燃问题。
 - 炼油厂中观察得知，床层中密相与稀相区存在约 100 F 的温差。
- 模型计算得知6、11、12号旋风分离器温度最高。
 - 炼油厂观测所得的高温区也位于上述三个旋风分离器分布位置。



引起后燃的原因

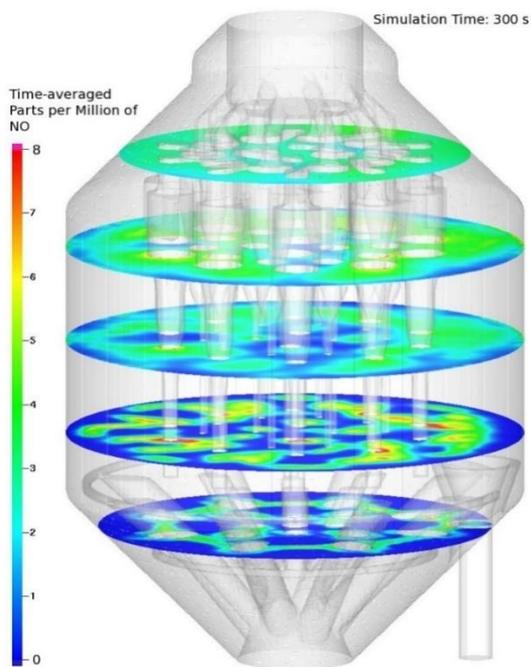
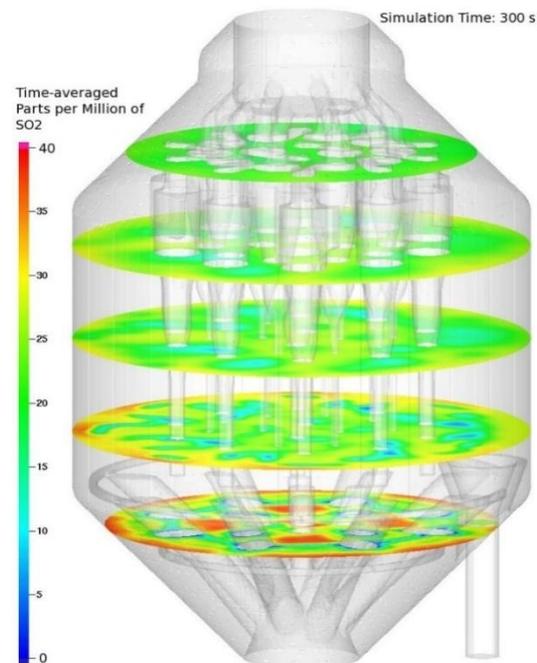
- 再生器中平均表观速度约为 0.74m/s (2.4ft/s)
- 受分布器最外侧进料臂的影响，烟道气体或蒸汽存在明显的高速区



- 气速较高的区域氧气浓度也较高；
- 大部分的氧气未能与床层进行良好的混合则快速溢出床层
- 再生器上部自由空间内固体颗粒含量较小，导致燃烧释放的热量难以及时移出，进而引起温度急剧上升。

烟气排放

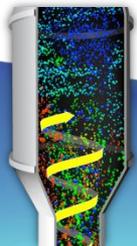
- 此外，该模拟也可对产物中污染物的含量进行估算
- 根据炼油厂实验数据可得，离开再生器的烟气中SO₂的含量约为30ppm；
 - 模拟值：20 ppm；
 - 与实际工况较符，结果合理。



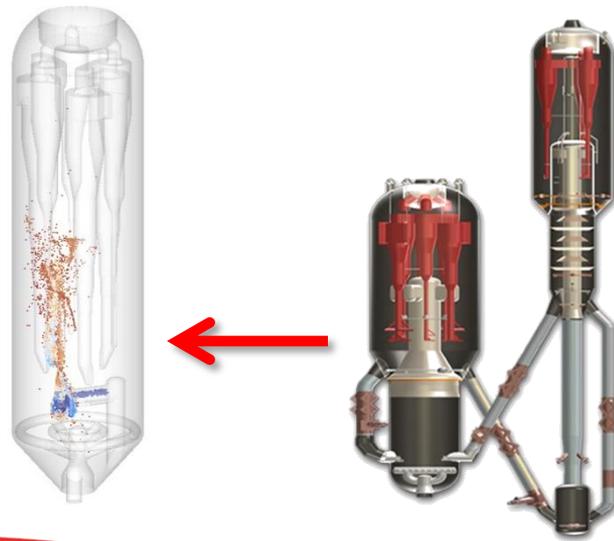
- 实验结果显示，烟气中NO的含量约为 40 ppm
 - 模拟值：5 ppm（旋风分离器入口处）
 - 与实验值偏差较大
- 可能引起偏差的因素：
 - 初始的颗粒组分中N₂含量过低
 - 反应速率计算不够准确，存在一定的波动
 - 忽略了NO的生成反应
 - NO的生成可能发生在床层上部的自由区

结论

- 模型可用于预测炼油厂中再生器内的后燃问题
 - 温度值 (100°F) 且不对称
 - 原因:
 - 与失效催化剂提升管及其分布器性能无关
 - 由床层混合及内部构件引起的其他短路引起的
- 用于估算烟气中污染气体的含量
 - SO₂ 的含量计算较为准确, 约为20 ppm (测量值: 30 ppm)
 - NO含量 计算误差较大, 约为5 ppm (测量值 40 ppm)
- 克服的技术难点:
 - 采用多个模型块的方法可用来解决一下问题:
 - 几何结构复杂: 容器含有内构件, 长度尺度范围广
 - 再生器模型中涉及的一些未知边界条件
 - 降低计算时间
 - 使用离散的、多种组分的颗粒系统:
 - 估算焦炭颗粒中极少量元素, 如N、S 所引起烟气污染物的排放量
 - 采用接近操作状态做初值, 加快收敛。



案例4: FCC再生器减排及减缓磨蚀问题的研究



BARRACUDA VR®

www.cpdf-software.com

SIMULATE > UNDERSTAND > OPTIMIZE

cpfd COMPUTATIONAL
PARTICLE
FLUID DYNAMICS

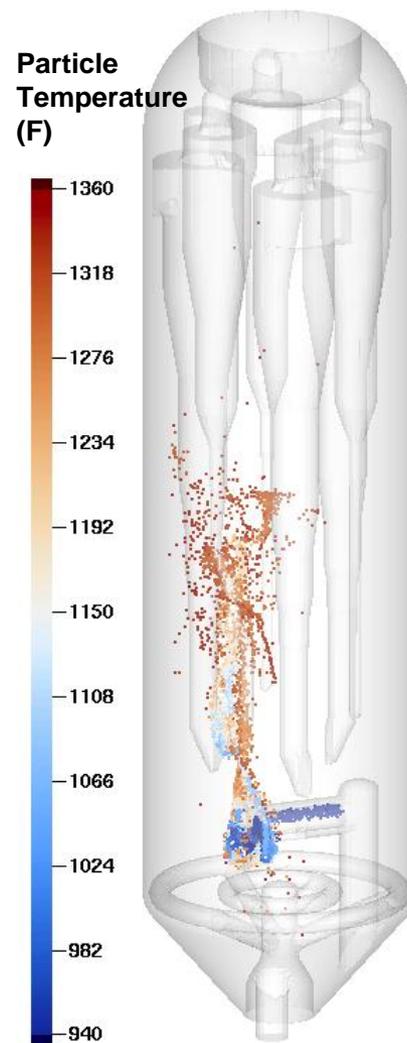
目标

一座北美的炼油厂寻求改进FCC再生器的方法，其旋风分离器及再生反应器顶部自由区均存在严重的腐蚀。

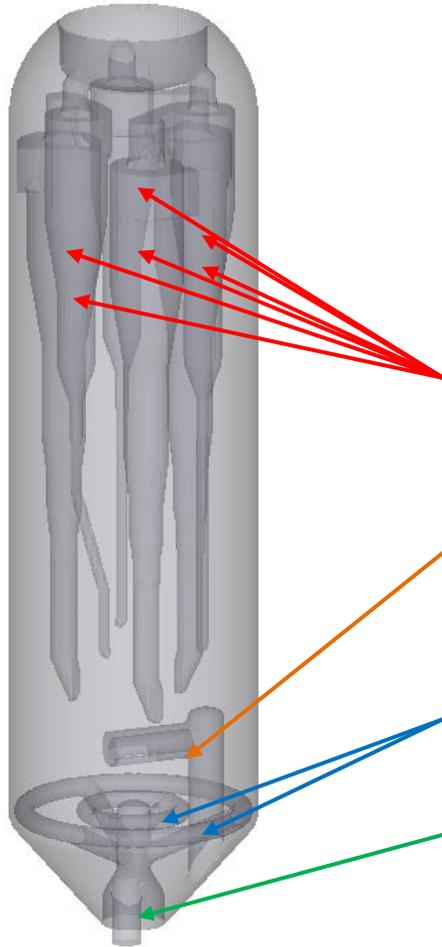
此外，为了降低CO的排放，反应器需要进入更多的氧气。

模拟结果主要包括：

- ✓ 气体及催化剂分布的不均匀性
- ✓ O₂的利用率
- ✓ CO的含量
- ✓ 受腐蚀情况



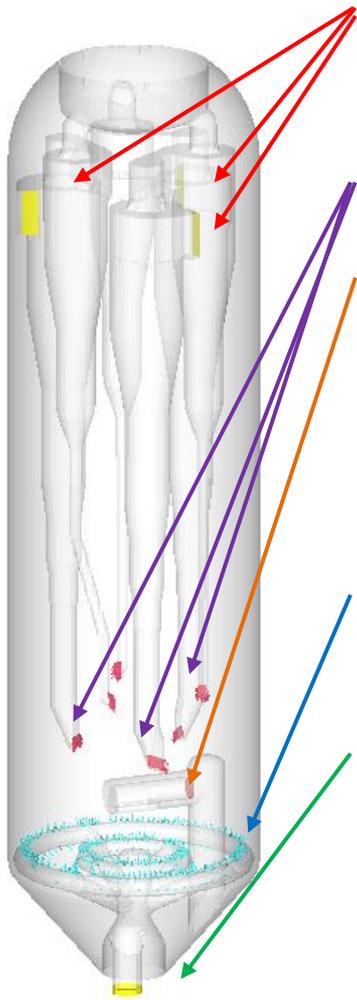
主要几何特征



FCC再生器高 70' (70英尺) ，内径为18' 10" 。 如图所示为三维再生器的内部空间，包括旋风分离器、浸入管及待生催化剂分布器。主要几何特征如下：

- **旋风分离器** - 一级旋风分离器（3个）、二次旋风分离器（3个）
- **失效催化剂分布器** - 失效催化剂及大部分空气均通过分布器进入再生器
- **环形空气分布器** - 两个环形空气分布器，共415个喷嘴
- **催化剂回收管**—再生后的催化剂颗粒通过立管采出

边界条件



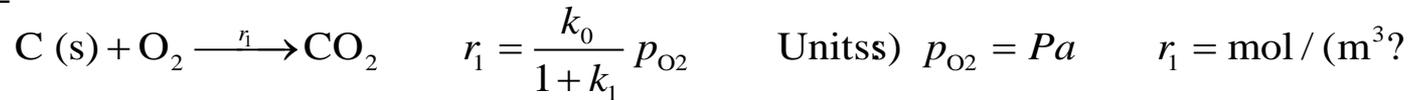
- 旋风分离器入口 – 三个旋风分离器的入口压力设置为28psig，颗粒从旋风分离器的料腿返回系统。每个旋风分离器的压降设置为1.5psi。
- 料腿 – 经旋风分离器入口离开系统的颗粒从相应的料腿返回系统。
- 失效催化剂入口 – 失效催化剂通过分布器进入系统，进料速率为12.2吨/min，空气流速为1049.2mscfh (H₂O体积分数为5.5%)。失效催化剂颗粒温度980F，空气温度198F，平均温度945F。
- 火炬油喷嘴 – 燃料蒸汽通过两个喷嘴进入系统，流速为 **460 lb/hr** 温度 **380F**。
- 空气分布器 – 空气 (5.5 mol% H₂O) 流速为2003.2mscfh，通过分布器上的415个喷嘴进入系统，喷嘴在Barracuda里采用“point source inject”模拟，空气温度386F。
- 催化剂采出立管 – 采出立管出口压力固定，颗粒经该出口流出系统。

化学反应

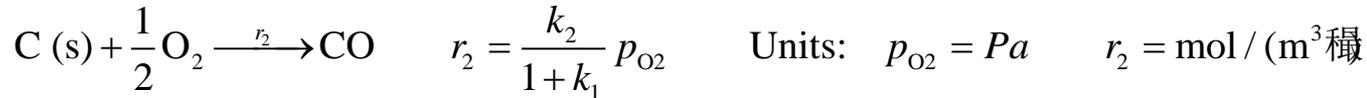
FCC再生反应机理采用Arbel等（1995）的研究结果，动力学参数根据Weisz（1966）、Weisz和Goodwin（1966）的研究结果获得。

积碳燃烧反应

- CO₂ 生成反应



- CO 生成反应
- $$k_0 = 87953.4 \theta_f^{-1} \exp\left(-\frac{18889 \text{ K}}{T}\right) \rho_{\text{C}} \quad k_1 = 2512 \exp\left(-\frac{-6795.56 \text{ K}}{T}\right)$$



- H₂O 生成反应
- $$k_2 = 2.20939 \times 10^8 \theta_f^{-1} \exp\left(-\frac{25684.6 \text{ K}}{T}\right) \rho_{\text{C}} \quad k_1 = 2512 \exp\left(-\frac{-6795.56 \text{ K}}{T}\right)$$



$$k_3 = 1.05544 \times 10^6 \theta_f^{-1} \exp\left(-\frac{18889 \text{ K}}{T}\right) \rho_{\text{H}}$$

化学反应

- CO燃烧反应
- 均相燃烧



$$k_4 = 5.071 \times 10^{14} \exp\left(-\frac{35556 \text{ K}}{T}\right)$$

- 异相燃烧

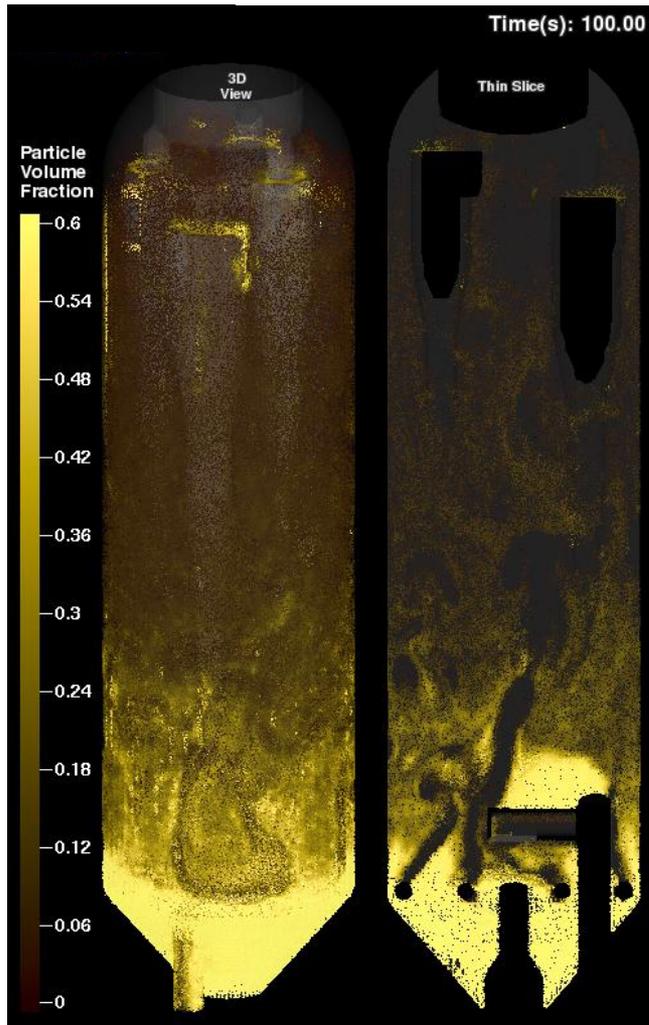


$$k_5 = 116.68 \theta_f^{-1} \exp\left(-\frac{13889 \text{ K}}{T}\right) \rho_{\text{CAT BASE}} \quad x_{pt} = \text{CO promoter multiplier}$$

- 参考文献:

- Arbel, A et al. (1995) Dynamic and Control of Fluidized Catalytic Crackers. 1. Modeling of the Current Generation of FCC's. *Ind. Eng. Chem. Res.* 34: 1228-1243
- Weisz, P. and Goodwin, R. (1966). Combustion of Carbonaceous Deposits within Porous Catalyst Particles. II. Intrinsic Burning Rate. *Journal of Catalysis* 6:227-236
- Weisz, P. (1966) Combustion of Carbonaceous Deposits within Porous Catalyst Particles. III. The CO₂/CO Product Ratio. *Journal of Catalysis* 6:425-430

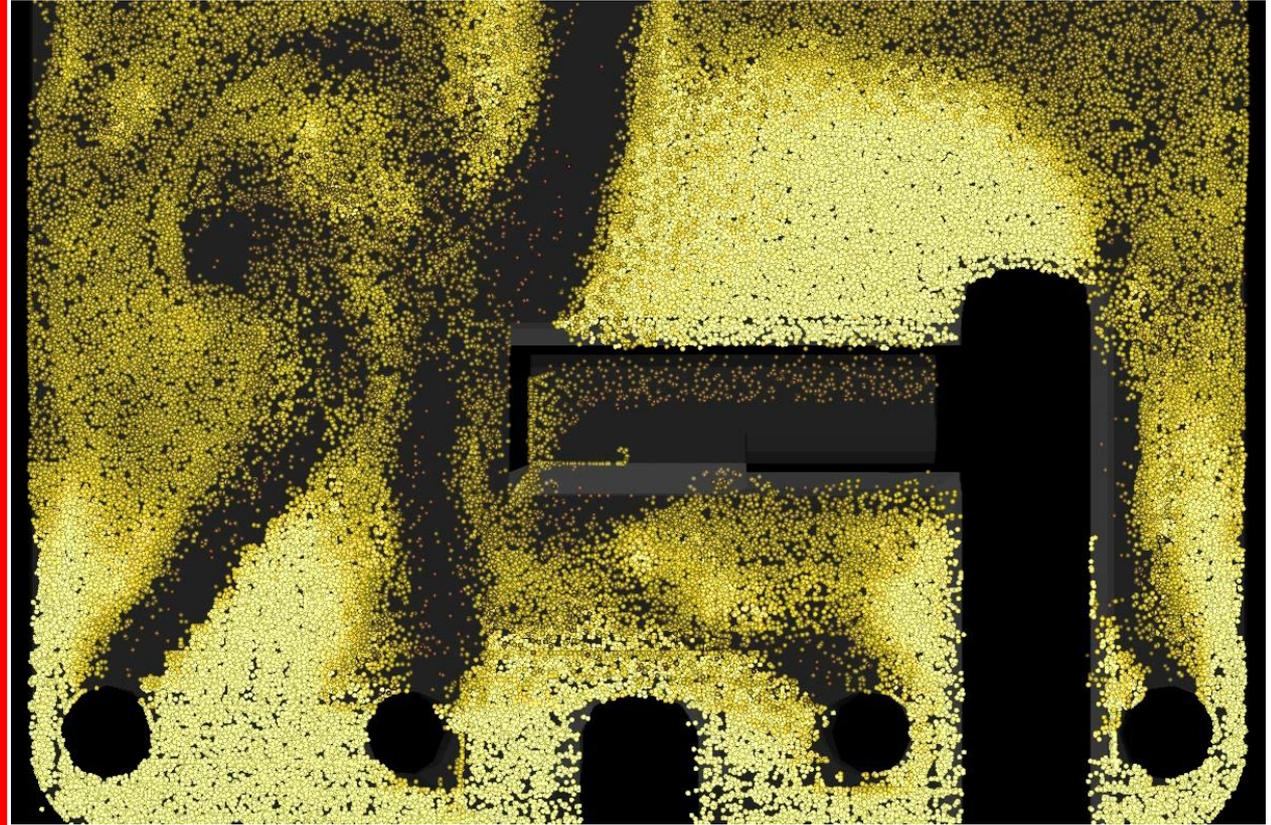
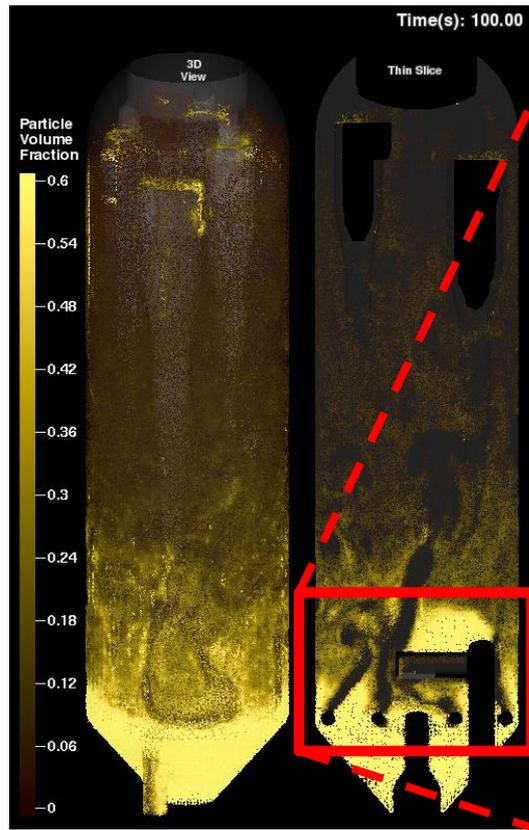
总体流动特征



- 颗粒及气体运动过程如动画所示，图例为颗粒体积分数。
 - 3D系统模型（左）
 - 切片位于催化剂分布器处(右)
- 从催化剂分布器出发的气体在密相床层内分布不均匀
- 气体环形分布器下方及催化剂分布器上方无流化效果。

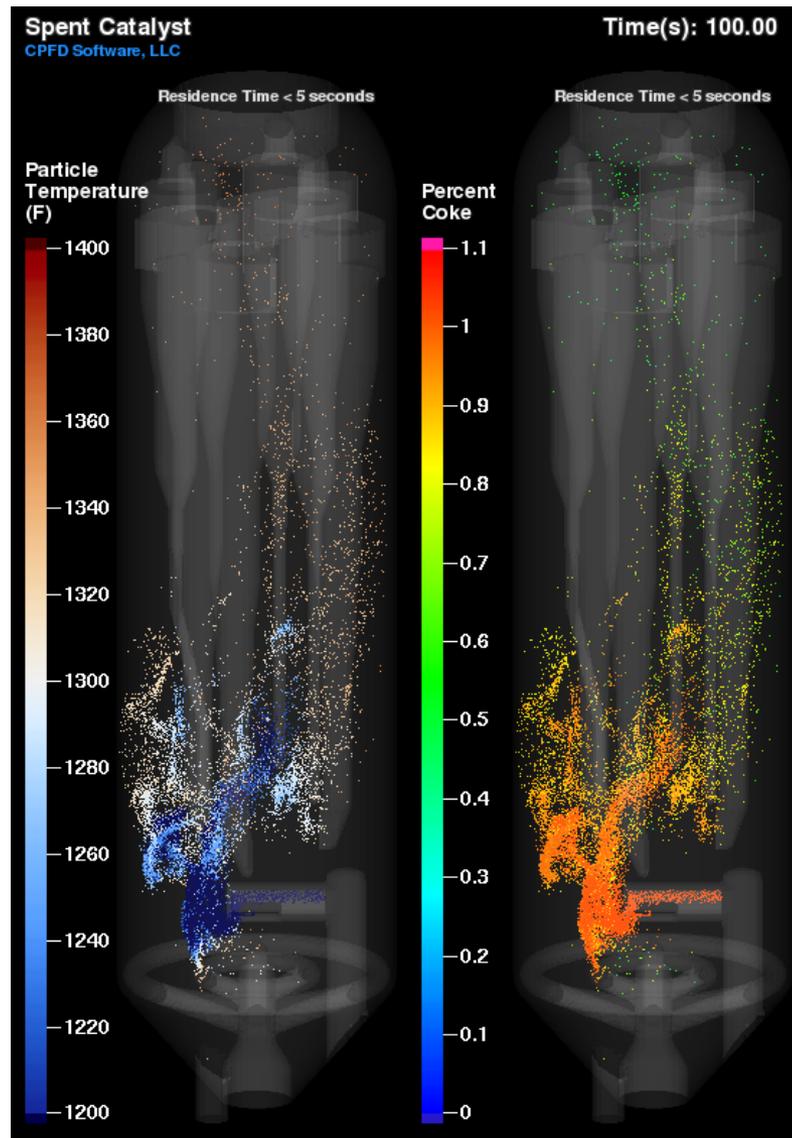
Click animation to begin playback

局部颗粒流动细节



失效催化剂分布器

- 动画显示，颗粒在气体带动下，流向SE部分（SE具体位置P59）。（注：动画中只展示了停留时间小于5s的颗粒）
- 大部分的失效催化剂颗粒流到自由区域，并在该部分完成再生反应。
- 极少部分的失效催化剂颗粒直接流道催化剂回收立管。
- 失效催化剂颗粒温度比床层平均温度低，因此在SE位置应可以观察到温度较低的区域。



Click animation to begin playback

BARRACUDA VR®

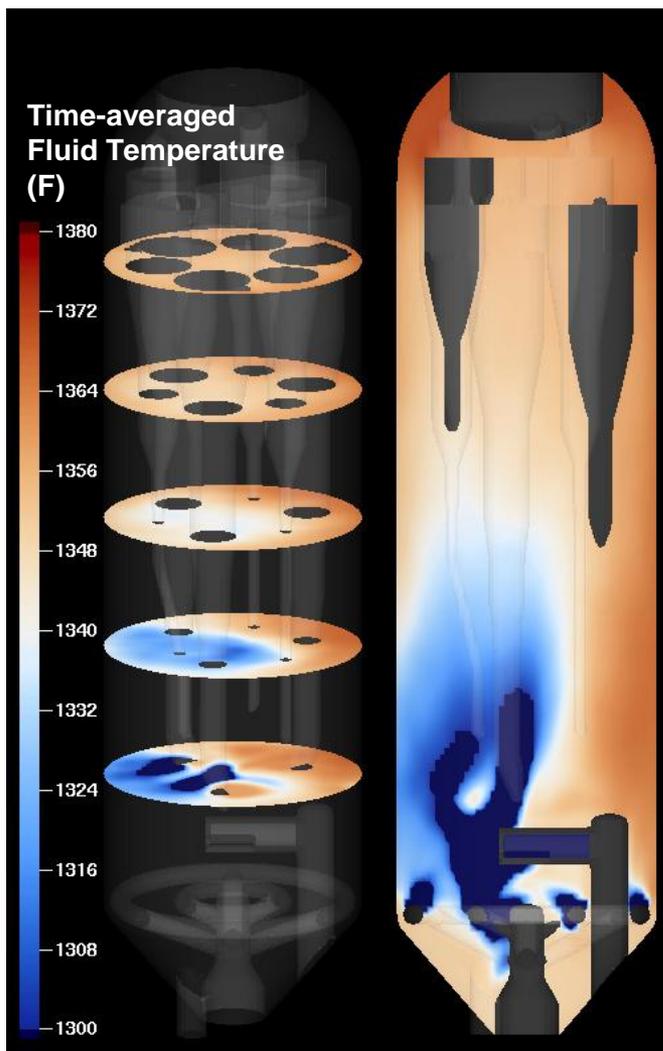
57

www.cpdf-software.com

SIMULATE > UNDERSTAND > OPTIMIZE

cpfd COMPUTATIONAL
PARTICLE
FLUID DYNAMICS

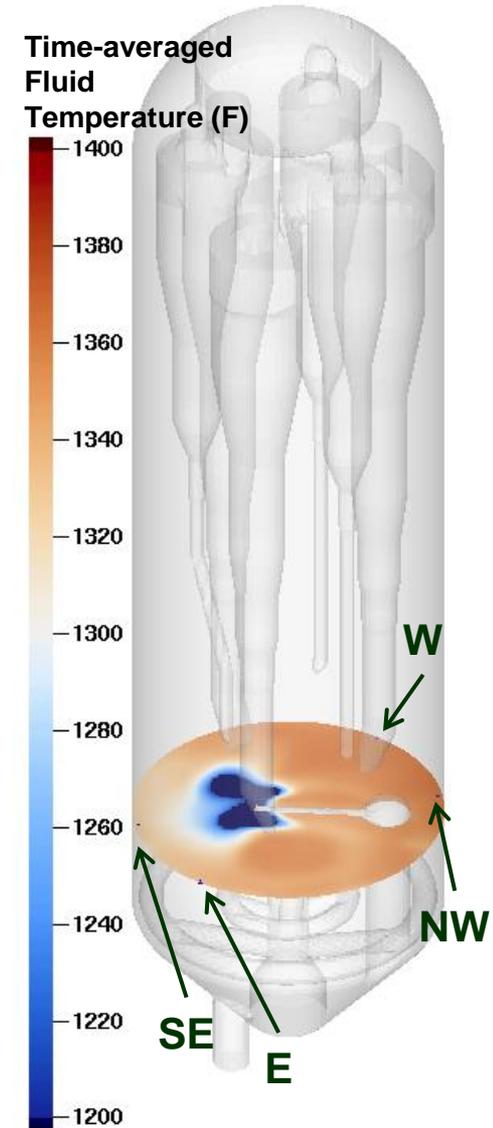
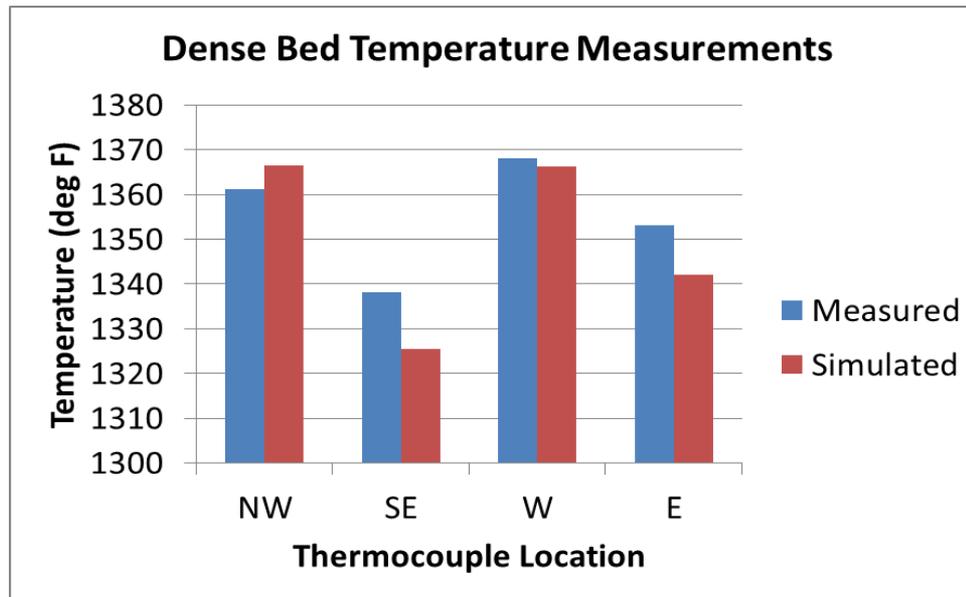
温度



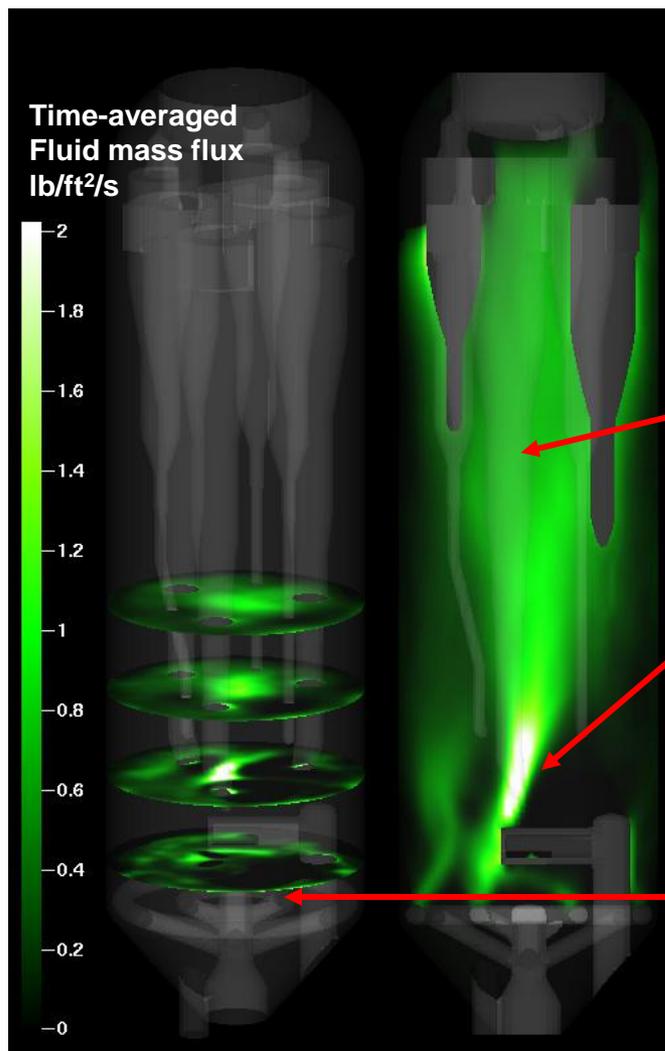
- 流体平均温度显示，温度较低的区域在密相床层中从催化剂出口到自由区域中部连续存在。随着高度的增加，低温区域向床层中心位置偏移。
- 该现象对CO燃烧速率的影响非常明显。观察反应速率可以发现，温度从1370F降到1320F会导致CO的均相燃烧速率及异相燃烧速率分别达63%及32%。

密相床层温度

- 工厂提供的热偶测试数据显示目前的FCC再生装置操作时存在明显的温度不均匀现象。装置的SE及E位置温度相对较低。（测量热偶位于环形空气分布器以上2m处）
- 温度的模拟及实验结果符合，进一步说明了装置内部存在失效催化剂分布不均匀现象。

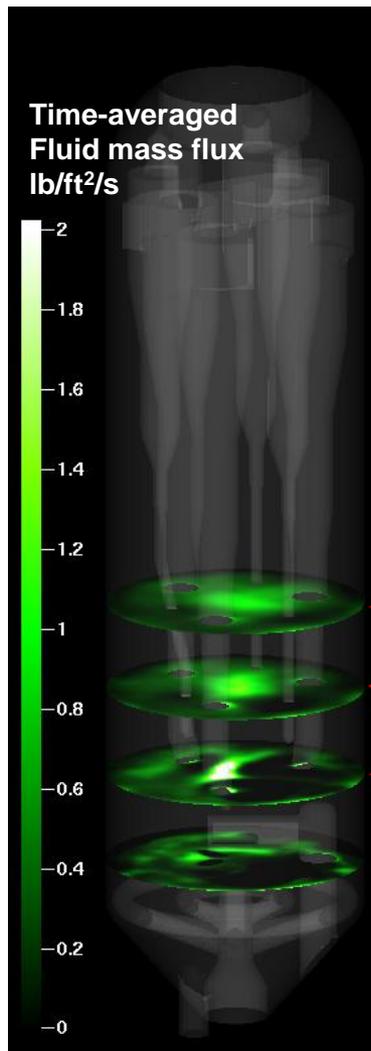


气相分布



- 图左所示为水平截面上流体质量通量分布；图右所示为失效催化剂分布器附近竖直截面上的流体质量通量分布。
- 在自由空间位置处，流体较为均匀并处在反应器中心位置。
- 流体向上运动的过程中偏向床层的一侧。
- 流体在SE位置发生偏转。
- rings环形空气分布器以上明显的流体沿壁面流动

流动均匀性的量化结果



- 通过分析流体质量通量给出了流体流动在不同截面处的均匀程度（时均结果）

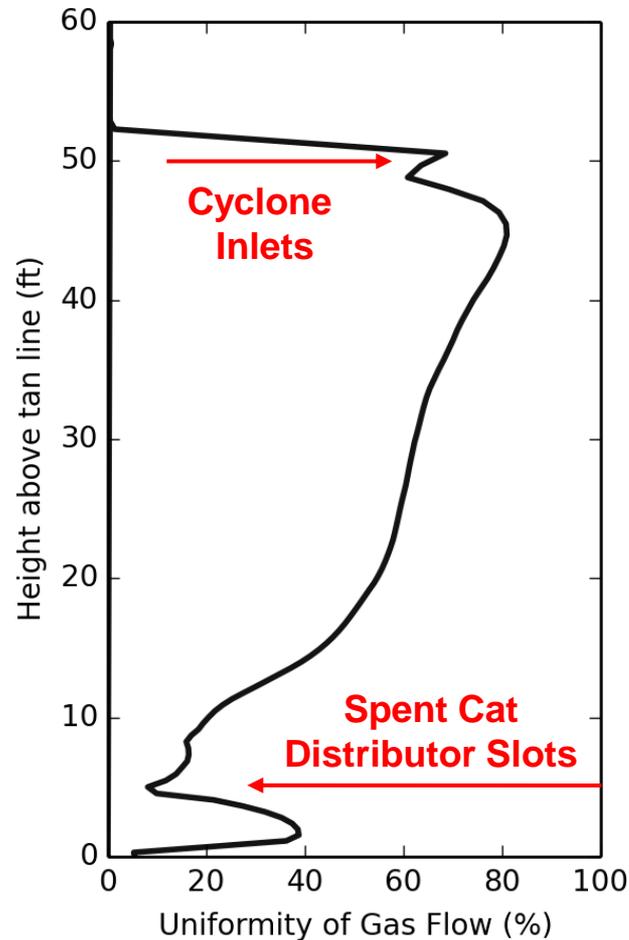
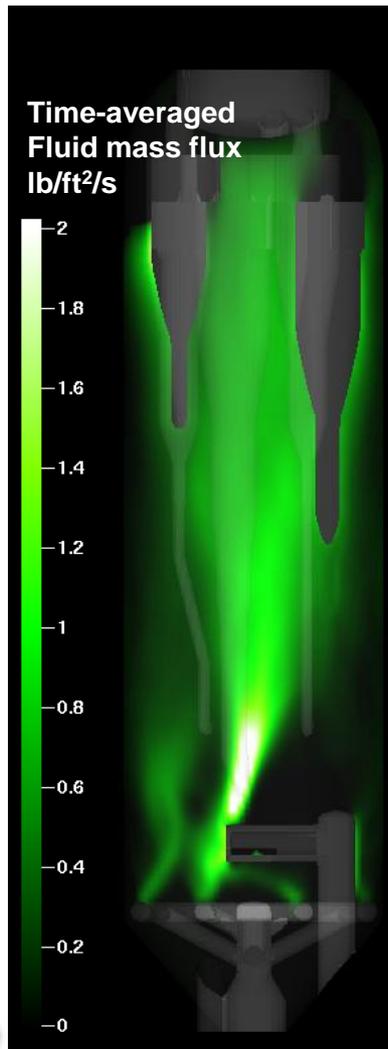
$$\text{uniformity} = \frac{\left(\sum_i F_i \frac{v_i}{v_T} \right)^2}{\sum_i F_i^2 \frac{v_i}{v_T}} \quad v_T = \sum_i v_i$$

F_i : cell i 中流体的质量通量 i

v_i = (cell i 的体积) x cell i 中流体体积分数)

- 计算得到的均匀度相当于每个截面上流体流通面积占截面面积的比例

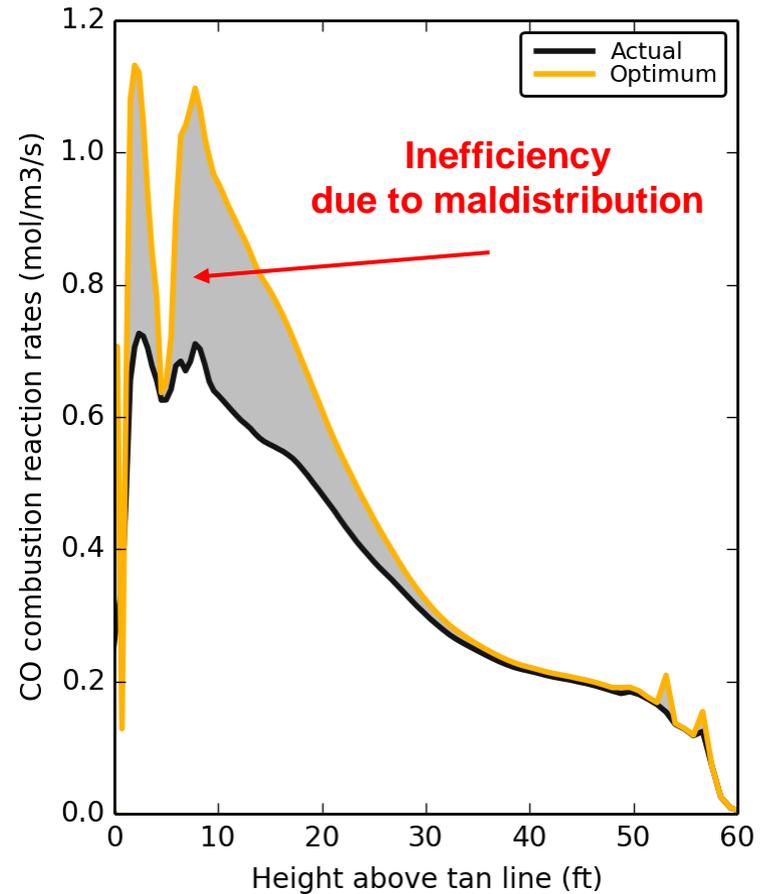
气体流动均匀性



- 计算各个截面上气体流动的均匀度，利用该数据来分析气体总的混合效果
- 失效催化剂分布器所在的截面处，流动均匀性从40%降到了10%，说明分布器是造成流动不均匀的重要原因
- 进一步的对该数据进行积分发现，整个反应器中气体的有效流动体积只占总体积的44%，导致气体的停留时间减小，同时降低了反应器燃烧CO的能力。

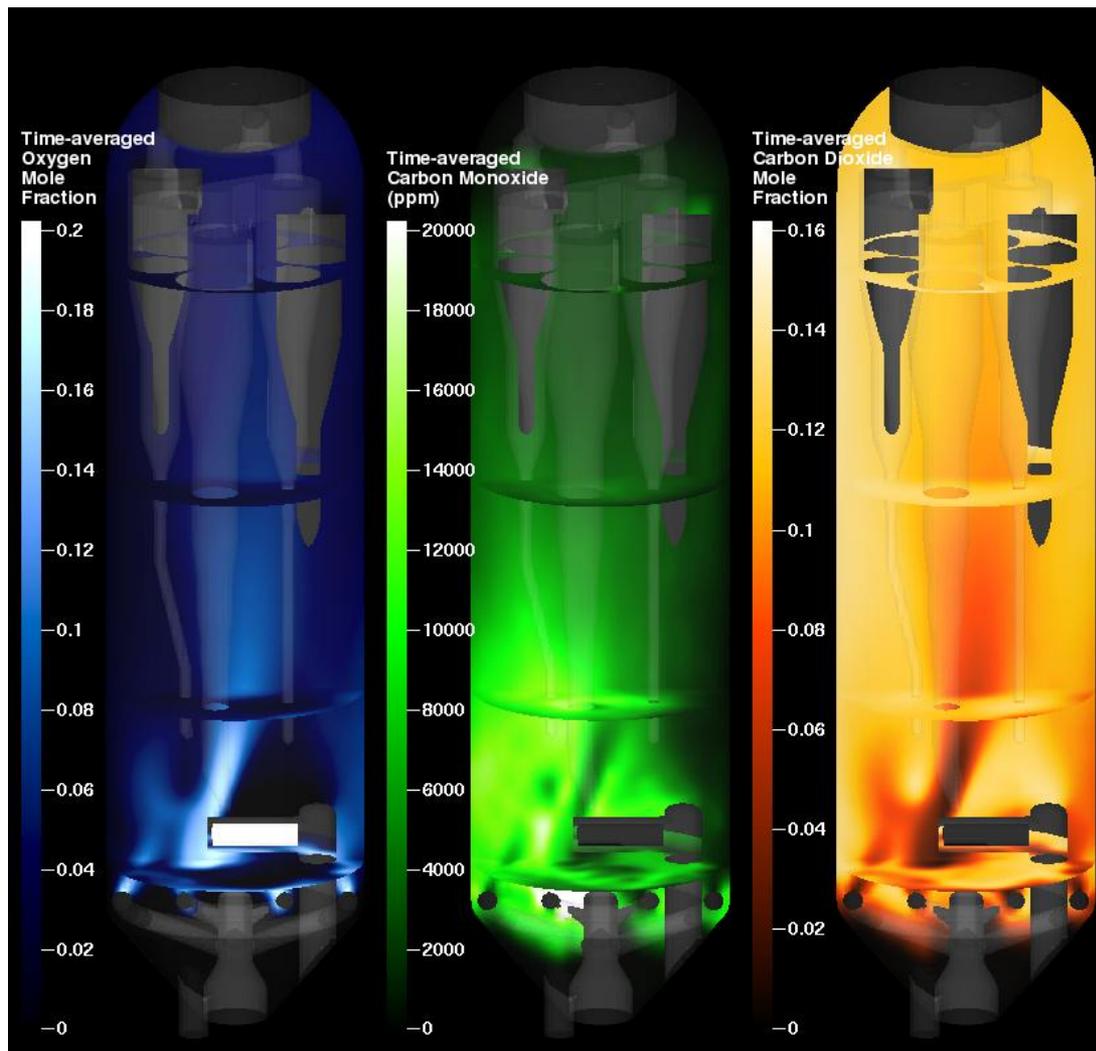
气体混合对CO的影响

- 对反应器的每个截面进行后处理，分析温度及气体组分分布对CO燃烧速率的影响。
- **Actual**曲线是将截面上每个网格的反应速率相加后的结果，代表模拟结果。
- **Optimum** 曲线是对应于该截面上的平均组成及平均温度下应有的反应速率，代表理想情况。两条曲线的区别说明低温区的存在以及失效催化剂分布器导致的氧气分布不均匀共同造成了反应器CO处理能力的下降。
- 通过提高气体混合效果，密相床层区及自由区域的下部，CO的燃烧速率可提高60%。

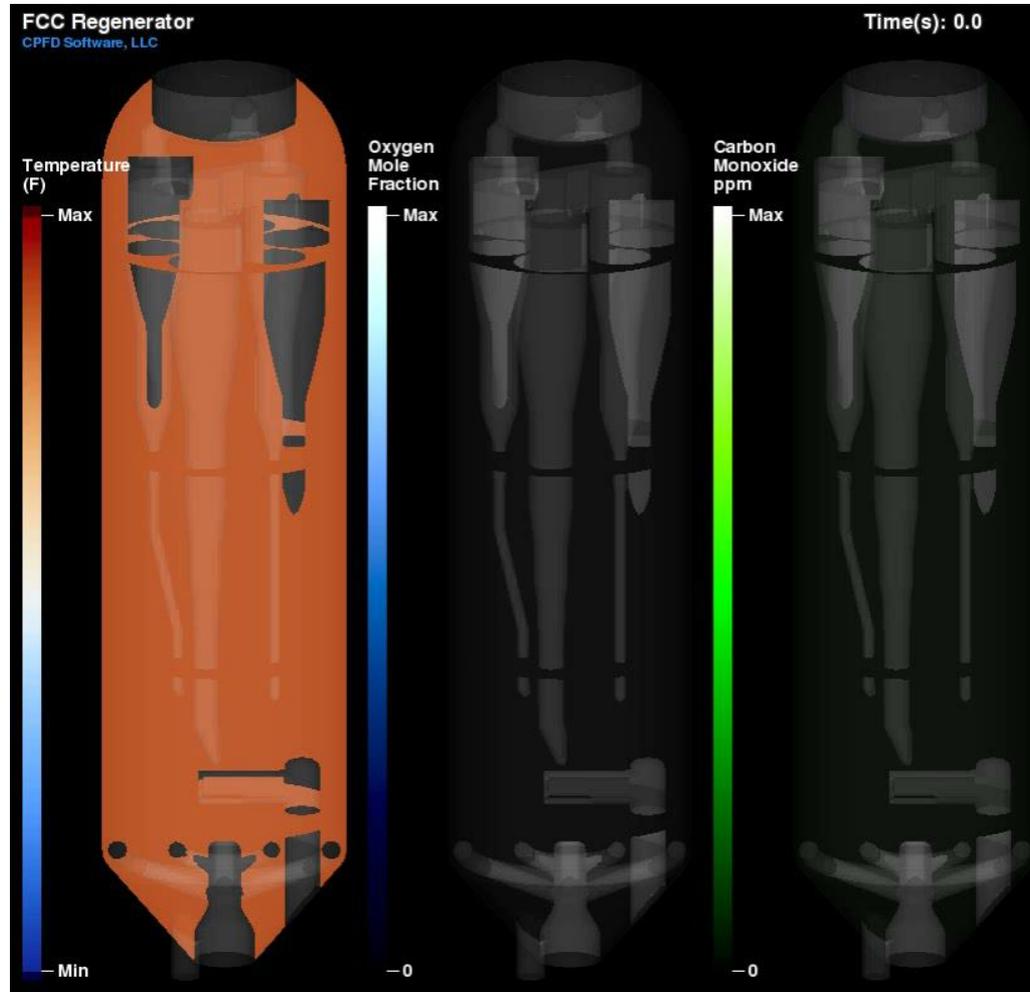


气体分布的时均结果

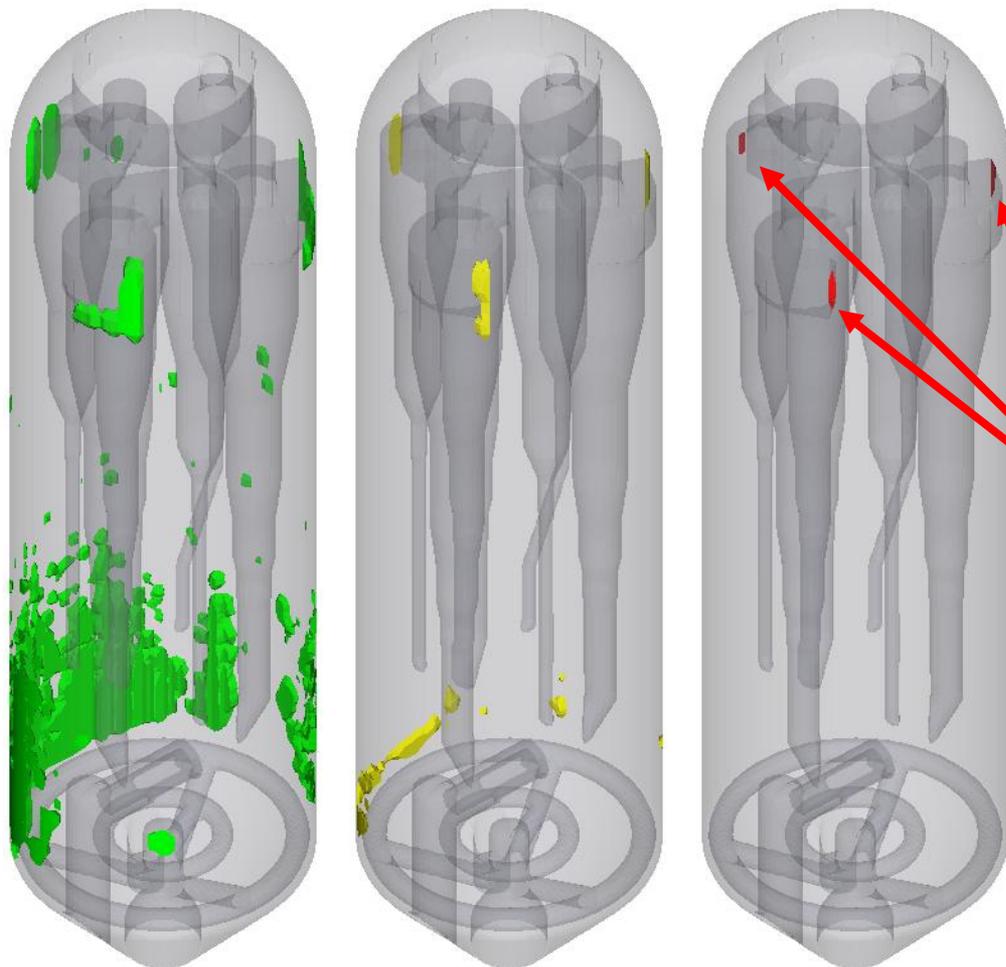
- 密相床层及自由区域CO在径向上分布相对均匀，同时自由区域氧气浓度较高
- 说明空气从环形分布器出来后，O₂在密相床层均匀的与催化剂表面积碳发生反应。
- 从失效催化剂分布器进入系统的氧气绕过了密相床层，应在自由区域参与CO燃烧反应。
- 自由区域的中心部分存在温度较低的区域，与温度较高的部分相比，该区域对CO的消除不利。



气体组分及温度



再生器壁面磨损

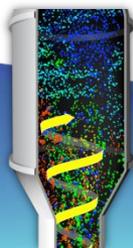


低度磨损

中等磨损

严重磨损

- 旋风分离器入口处，壁面磨损严重。
- 环形空气分布器上方壁面存在中等及较低程度的壁面磨损，且在靠近立管的一侧磨损相对严重。
- 根据厂商报告，旋风分离器入口处磨损明显。



结论

- 催化剂分布器设计不合理，导致反应器内部分布不合理
 - 由于失效催化剂分布器设计及布置，失效的催化剂主要流向反应器的SE区域
 - 经由该分布器进入反应器的空气主要通过反应器中部向上流动，而反应器中部催化剂颗粒分布较少。
- 反应器中部O₂过量，同时沿壁面处，CO过量
 - 需要引入更多的氧气，以保证排放气体中CO含量达标。
- 磨损
 - 壁面上某些位置存在严重磨损
 - 改进装置提高混合效果及CO燃烧效率可降低对空气流量的要求，进而减小颗粒对壁面的磨损。同时，厂商可以考虑加大旋风分离器入口与反应器外壁面间的距离。

