

玉米秸秆鼓泡床内快速热解过程 数值模拟研究

董楠航¹, 王 攀¹, 刘荣厚²

(1. 东北电力大学能源与动力工程学院, 吉林 132012; 2. 上海交通大学农业与生物学院生物质能工程研究中心, 上海 200240)

摘 要: 采用数值模拟对鼓泡床内玉米秸秆快速热解过程进行描述并对产物分布进行预测, 深入了解高温热解反应器内气固流动特性及传热传质过程, 进而对系统运行参数进行优化设计。模拟结果表明, 流化风风速决定秸秆颗粒在反应器内的运动轨迹; 床内平均空隙度的变化可影响床内换热过程, 形成热解产物产率分布的差异。实验结果对比表明数值模拟在定量分析准确度上仍需进一步提高。

关键词: 热解; 流化床; 生物质; 计算流体力学

中图分类号: TK6; S216.2 **文献标识码:** A

0 引 言

生物质热化学转化法是实现其资源化利用的主要技术之一。采用数值手段对生物质热化学转化过程进行研究对实验工作起到重要的辅助指导作用。薛爱军等^[1]对下吸式生物质气化炉不同的数值模拟方法进行分析对比; 张 玉等^[2]对生物质旋风热解炉进行模拟并讨论不同湍流模型的有效性; 卢洪波等^[3]对生物质与煤共燃过程进行模拟; 虞君武等^[4]对鼓泡床内空气为气化介质的木材气化过程进行模拟; Xue 等^[5]应用欧拉-欧拉模型研究木屑气化过程中颗粒密度分布对气固流动的影响; Ranganathan 等^[6]研究蔗渣、松木和山毛榉木屑热解过程中不同的反应动力学机理产物预测准确性; Xiong 等^[7]对生物油产量与流化床床层高度及床料粒径之间的关系进行研究。Mellin 等^[8]应用 134 种组分和 4169 个组分间化学反应对生物油二次裂解进行描述。本文采用欧拉-欧拉模型对实验室尺度鼓泡床内玉米秸秆热解过程进行数值模拟研究。通过应用气固两相流态化模型、气固两相相间传热模型及生物质快速热解多组分模型等对玉米秸秆的热解产物分布进行数值预测, 并对模拟结果进行实验验证分析。

1 数值模型建立

1.1 生物质热解模型

生物质热解过程的动力学模型常见的有一步反应机理^[9]和多组分反应机理^[11]。一步反应机理中相关动力学常数基于假设为均质组分的原料颗粒热失重过程进行计算, 与样品的品质直接相关, 不同样品间适用偏差较大。多组分反应机理对生物质类原料的 3 种主要组成成分的热解过程分别进行研究, 尽管模型中虚拟中间产物的引入存在争议, 但该方法提高了模型的通用性。三组分反应模型适用于玉米秸秆热解过程描述。由实验分析可知, 所选原料玉米秸秆中纤维素、半纤维素及木质素的质量分数分别为 37.6%、21.6% 和 18.4%^[10]。热解过程中相应反应速率可依据阿列尼乌斯公式进行计算, 相关热解模型及动力学参数^[11,12]如图 1 和表 1 所示。

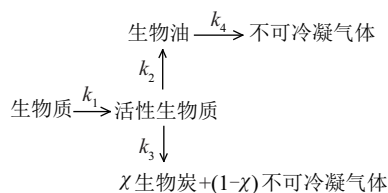


图1 生物质三组分热解动力学模型

Fig. 1 Reaction scheme of biomass pyrolysis

收稿日期: 2016-06-27

基金项目: 长江学者和创新团队发展计划(IRT_17R19); 吉林市科技创新发展计划(20166004)

通信作者: 刘荣厚(1960—), 男, 博士、教授、博士生导师, 主要从事可再生能源与环境工程方面的研究。liurhou@sjtu.edu.cn

表 1 热解动力学参数
Table 1 Reaction constants

反应常数	A_i/s^{-1}	$E_i/\text{J}\cdot\text{kmol}^{-1}$	炭生成率
$k_{1,\text{cel}}$	2.80×10^{19}	2.424×10^8	—
$k_{2,\text{cel}}$	3.28×10^{14}	1.965×10^8	—
$k_{3,\text{cel}}$	1.30×10^{10}	1.505×10^8	—
χ_{cel}	—	—	0.35
$k_{1,\text{hem}}$	2.10×10^{16}	1.867×10^8	—
$k_{2,\text{hem}}$	8.75×10^{15}	2.024×10^8	—
$k_{3,\text{hem}}$	2.60×10^{11}	1.457×10^8	—
χ_{hem}	—	—	0.60
$k_{1,\text{lig}}$	9.60×10^8	1.076×10^8	—
$k_{2,\text{lig}}$	1.50×10^9	1.438×10^8	—
$k_{3,\text{lig}}$	7.70×10^6	1.114×10^8	—
χ_{lig}	—	—	0.75
k_4	4.28×10^6	1.08×10^8	—

1.2 欧拉-欧拉模型

固体颗粒流态化过程中具有与气相相似的动力学特性,由此可建立与气体流动特性相似的控制方程进行描述。

对于气相组分 i , 可建立守恒方程:

$$\frac{\partial}{\partial t}(\varepsilon_g \rho_g Y_i) + \nabla \cdot (\varepsilon_g \rho_g \vec{u}_g Y_i) = \dot{M}_i \quad (1)$$

式中, ε_g 、 ρ_g 、 Y_i 、 \vec{u}_g 、 \dot{M}_i ——气相体积分、密度、气相组分 i 的质量分数、气相速度、气相组分 i 质量变化率。

气相质量守恒方程为:

$$\frac{\partial}{\partial t}(\varepsilon_g \rho_g) + \nabla \cdot (\varepsilon_g \rho_g \vec{u}_g) = \sum_{i=1}^n \dot{M}_i \quad (2)$$

气相动量守恒方程为:

$$\frac{\partial}{\partial t}(\varepsilon_g \rho_g \vec{u}_g) + \nabla \cdot (\varepsilon_g \rho_g \vec{u}_g \vec{u}_g) = -\varepsilon_g \nabla p + \nabla \cdot \vec{\tau}_g + \varepsilon_g \rho_g \vec{g} + R + I \quad (3)$$

式中, p 、 $\vec{\tau}_g$ 、 R 、 I ——压力、气相应力张量、气固两相动量交换源项、异相反应动量交换源项。

气相能量守恒方程为:

$$\frac{\partial}{\partial t}(\varepsilon_g \rho_g H_g) + \nabla \cdot (\varepsilon_g \rho_g H_g \vec{u}_g) = -\nabla \cdot \vec{q}_g + Q + S_g \quad (4)$$

式中, H_g 、 \vec{q}_g 、 Q 、 S_g ——气相比焓、气相导热项、气固两相间热量交换源项、化学反应热源项。

对于固相组分 j , 可建立守恒方程:

$$\frac{\partial}{\partial t}(\varepsilon_s \rho_s Y_j) + \nabla \cdot (\varepsilon_s \rho_s \vec{u}_s Y_j) = \dot{M}_j \quad (5)$$

式中, ε_s 、 ρ_s 、 Y_j 、 \vec{u}_s 、 \dot{M}_j ——固相体积分、密度、固相组分 j 的质量分数、固相速度、固相组分 j 质量变化率。

固相质量守恒方程为:

$$\frac{\partial}{\partial t}(\varepsilon_s \rho_s) + \nabla \cdot (\varepsilon_s \rho_s \vec{u}_s) = \sum_{j=1}^m \dot{M}_j \quad (6)$$

固相动量守恒方程为:

$$\frac{\partial}{\partial t}(\varepsilon_s \rho_s \vec{u}_s) + \nabla \cdot (\varepsilon_s \rho_s \vec{u}_s \vec{u}_s) = -\varepsilon_s \nabla p - \nabla p_s + \nabla \cdot \vec{\tau}_s + \varepsilon_s \rho_s \vec{g} - R - I \quad (7)$$

式中, p_s 、 $\vec{\tau}_s$ ——固相压力、固相应力张量。

固相能量守恒方程为:

$$\frac{\partial}{\partial t}(\varepsilon_s \rho_s H_s) + \nabla \cdot (\varepsilon_s \rho_s H_s \vec{u}_s) = -\nabla \cdot \vec{q}_s - Q + S_s \quad (8)$$

式中, H_s 、 \vec{q}_s 、 Q 、 S_s ——固相比焓、气相导热项、气固两相间热量交换源项、化学反应热源项。

玉米秸秆热解过程中产物生成通过相间组分输运模型实现。气相与固相间动量交换通过 Gidaspow 模型计算;固相之间的动量传递采用 Syamlal 模型计算;气固相间传热量通过 Gunn 模型所计算的相间换热系数进行估算;固相之间的传热本文未考虑,详细的封闭方程参阅 ANSYS/Fluent 软件的用户手册。

2 几何结构模型及数值解法

2.1 计算模型建立

为了减少气固流动数值模拟的计算强度,实验所用鼓泡床反应器简化为二维模型进行模拟计算,如图 2 所示。秸秆样品从侧方入口由载气 N_2 吹入,样品颗粒尺寸为 0.4 mm,相应物性参数详见表 2;将 0.4 mm 的球形石英砂颗粒预置于反应器内,静态床高 50 mm,初始堆积空隙度定为 0.37;流化风 N_2 以给定风量从底部布风板均匀吹入加热反应器以实现床内完全流化状态。基于文献[13,14]中关于气固鼓泡床网格尺寸无关性研究结果,本工作采用结构化网格对计算区域进行离散,定义网格尺寸为 5 mm,气固流动密相反应区进行局部网格加密至 3 mm。

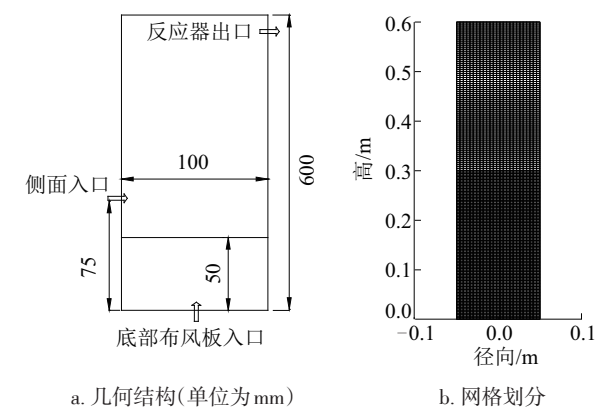


图2 反应器几何结构及网格划分细节
Fig. 2 Schematic of reactor and domain discretization

表2 物性参数 Table 2 Physical parameters	
参数	数值
秸秆密度/ $\text{kg}\cdot\text{m}^{-3}$	400
生物炭密度/ $\text{kg}\cdot\text{m}^{-3}$	200
石英砂密度/ $\text{kg}\cdot\text{m}^{-3}$	2500
秸秆比热容/ $\text{J}\cdot(\text{kg}\cdot\text{K})^{-1}$	1500
生物炭比热容/ $\text{J}\cdot(\text{kg}\cdot\text{K})^{-1}$	1100
石英砂比热容/ $\text{J}\cdot(\text{kg}\cdot\text{K})^{-1}$	835
合成气粘度/ $\text{Pa}\cdot\text{s}$	3×10^{-5}
生物质热导率/ $\text{W}\cdot(\text{m}\cdot\text{K})^{-1}$	0.105
生物炭热导率/ $\text{W}\cdot(\text{m}\cdot\text{K})^{-1}$	0.071
石英砂热导率/ $\text{W}\cdot(\text{m}\cdot\text{K})^{-1}$	0.35
秸秆颗粒直径/mm	0.4
石英砂直径/mm	0.4

2.2 数值解法及简化假设

上述控制方程和封闭方程通过商业 CFD 软件 ANSYS/Fluent 进行求解计算;化学反应动力学模型通过用户自定义函数(UDF)耦合计算;反应器入口采用速度入口边界条件,按工况 1、工况 3 和工况 4 分别设定速度为 0.8、0.5 和 0.2 m/s,相应反应器出口按压力出口条件进行定义。同时在工况 1 设定条件下修改压力出口边界条件为自由出流边界建立工况 2;壁面条件设定中对于气相采用无滑移条件而固相采用自由滑移边界处理;应用 SIMPLE 算法建立速度压力耦合关系,数值模拟过程采用较小时间步长 10^{-4} s 进行计算单步实现收敛,模拟计算真实时间 40 s 以减小粒相初始流化过程对计算结

果的影响。
模拟过程中对实际情况采用以下简化假设:
1)样品及石英砂颗粒为完美球形,球形度为 1;2)忽略样品中灰分的影响,剩余组分质量分数进行折算总和仍为 1;3)忽略热解过程中生物炭对焦油蒸气的催化裂解过程;4)石英砂与秸秆颗粒间换热忽略不计;5)忽略辐射换热对热量交换的影响。

3 结果及讨论

3.1 不同出口边界条件的影响

数值模拟中分别采用压力出口(工况 1)和自由出流出口(工况 2)边界条件分别进行计算,反应器出口位置粒相中生物炭质量分数分布如图 3 所示。图 3a 中压力出口条件下反应器出口附近生物炭质量分数在一薄层区域内急剧减小至零,形成明显梯段变化区域。图 3b 为自由出流出口边界,反应器出口附近质量分数分布均匀。在压力出口边界条件下,出流边界生物炭质量分数初始定义为常数零,

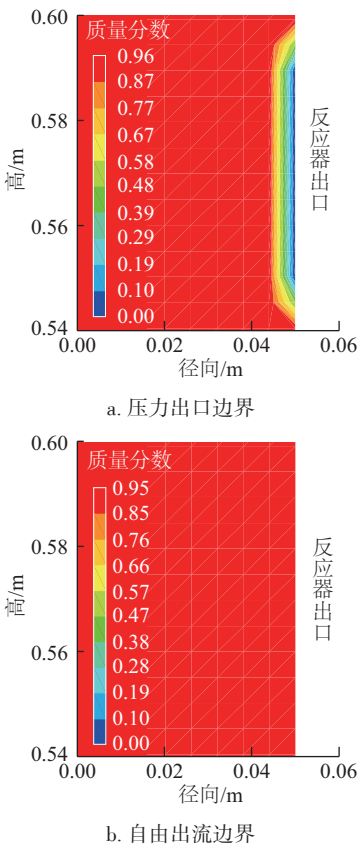


图3 反应器出口处粒相中生物炭质量分数分布
Fig. 3 Mass fraction of bio-char at the reactor outlets

同时在迎风算法条件下出口处形成非零区域,由此产生明显浓度梯度变化薄层,而自由出流边界上质量分数由迎风算法计算获得,则不会形成该薄层。根据不同出口边界条件下模拟结果得到,20~40 s 内流化床平均床高分别为 0.139 和 0.143 m,误差小于 3%,因此忽略出口边界条件的不同定义方式对流化床动力学特性的影响。

3.2 不同流化风量的影响

图 4a 为流化风风速为 0.8 m/s 时流化床内可见气泡的尺寸及粒相的浓度分布;图 4b 和图 4c 为流化风速减至 0.5 和 0.2 m/s 时相应的模拟结果。随着流化风风量的减小,图 4 中流化床密相床内麻料层区域所示气泡的尺寸明显减小;由气相体积分数分布可知,粒相颗粒所能达到的高度随流化风量的减小也相应降低,表明动态床膨胀系数相应变小;同时床内颗粒运动趋于平缓,密相床上表面趋于平稳,床内平均粒相浓度增大。由于流化床流化强度随流化风速的变化发生相应改变,可直观准确地表征流化床内的气固流动的动力学特性、有效优化生物质颗粒热解过程参数(如颗粒热温度场内停留时间、生物质颗粒与流化床间换热效率等)。研究表明,

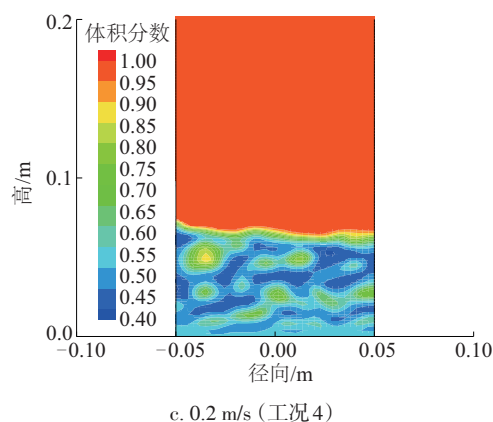
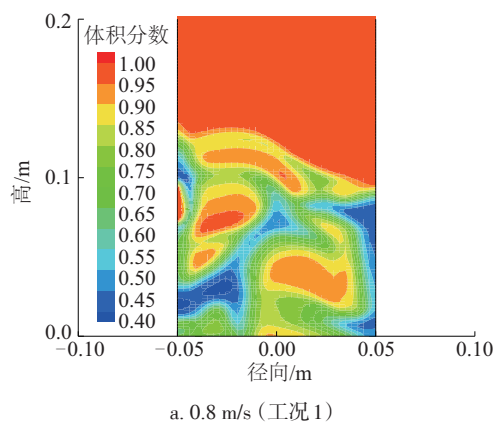


图 4 不同流化风风速条件下床内动力学特性:

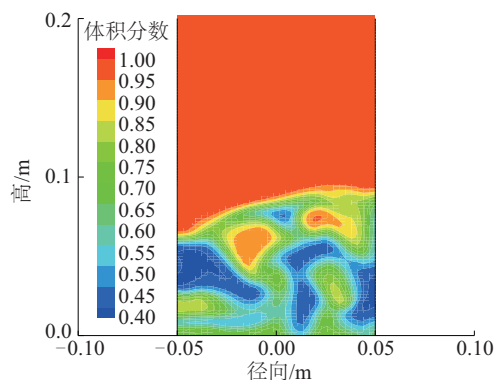
Fig. 4 Hydrodynamics of fluidized beds at different gas velocities

生物质热解固体产物生物质炭会加速生物油蒸气二次裂解速率,因此控制合理流化风速,完成生物质热解反应的同时快速进行气固分离是提高生物油产率的必要手段之一。

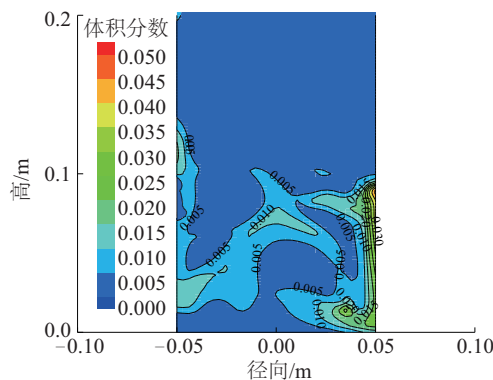
图 5 所示为不同流化风风速条件下生物质颗粒在床内的浓度分布。流化风速为 0.8 m/s 时,床内生物质颗粒浓度明显小于流化风速为 0.5 m/s 时。在此条件下,随着流化风风速的减小,生物质颗粒逃离反应器的质量减少,更多颗粒留存于流化床反应器内形成颗粒堆积,体现为床内浓度相对较高。当流化风速为 0.2 m/s 时,生物质颗粒不具备脱离反应器所需的动能,反应后颗粒完全滞留于床内,随石英砂形成流化床层混合床料。由于 2 种固体颗粒密度相差明显,因此低速时在床内形成床料分层,在床层上部形成明显生物质颗粒聚集区(图 5c)。流化床在 0.2 m/s 流化风速下运行,生物质热解残留生物质炭颗粒不断聚集,浓度不断增大,对热解生物油蒸气的催化裂解效应逐步增强,严重影响生物油



a. 0.8 m/s (工况 1)



b. 0.5 m/s (工况 3)



a. 0.8 m/s (工况 1)

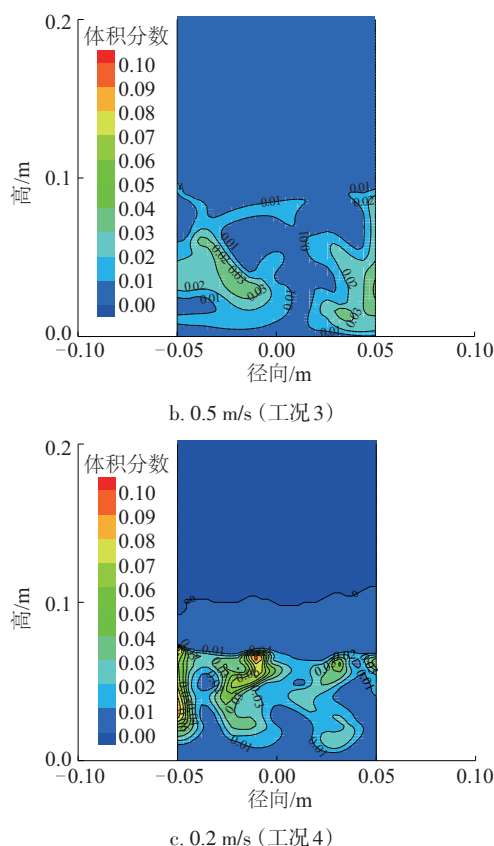


图5 不同流化风速下生物质颗粒的浓度分布
Fig. 5 distributions of biomass samples at different gas velocities

的最终产率。因此增大流化风风速对于缩短生物质炭与生物油蒸气的接触时间、减小生物油蒸气的二次裂解速率是可参考的手段之一。

3.3 生物质热解产物分布特点

图6所示为不同流化风风速条件下反应器出口处生物质热解产物中不可冷凝气体与生物油蒸气的产率比。由模拟结果可知,当流化风速为0.8和0.5 m/s时,所得产物分布的比率大致相等(约为0.3)。当流化风速较低(降为0.2 m/s时),不可冷凝气体在热解产物分布中所占比例相对减少,此时不可冷凝气体及生物油蒸气比率约为0.22。计算所得结果表明,随着流化风风速的减小,生物油蒸气的产率明显提高。

由图5和图6可知,当流化风风速较高时,能有效提高生物质颗粒反应完成后成功脱离反应器的效率,从而缩短反应器内生物油蒸气与生物质炭的接触时间,但较大的风速形成了较大气泡,床内平均空隙率增大,弱化了生物质颗粒与流

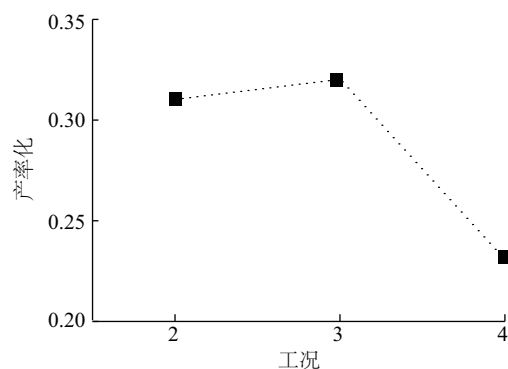


图6 不同流化风速下不可冷凝气体与油蒸气比率分布

Fig. 6 Ratios of syngas over vapours at different velocities

化床间的换热,直接影响生物质热解生物油蒸气的产率。由于热解模型中并未考虑二次热解过程生物质炭的催化效应,因此无法定量分析风速变化,二次裂解效应及热解过程综合作用下油产率的变化。但由目前所得结果可知,风速对气固分离效率及热解产油率的作用相反,因此需进行流化风风速的优化计算以实现油产率的最大化。

3.4 模拟结果实验验证

基于文献[10]所报道的实验结果,当生物质颗粒小于0.45 mm,反应温度为773 K,气体停留时间为1 s时,生物质颗粒热解产物分布(质量分数)分别为生物质炭13.3%,不可冷凝气体45%,生物油蒸气41.67%,不可冷凝气体与生物油蒸气比率1.08。实验所得结果与数模结果存在差异,主要源于以下几个方面:1)热解反应过程温度及生物质加热速率对热解产物分布有重要影响,相应参数的控制在实验过程中具有一定难度,易形成偏差;2)生物油蒸气停留过程的二次裂解有利于不可冷凝气体产率的增大,相应减小了油蒸气产率;3)模拟过程中进行了原料组分的折算,会带来产率的不同;4)数值模拟过程对换热系数的计算采用经验公式所得,对换热过程的描述需进一步细化以提高传热过程模拟的准确性;5)反应动力学描述为简单通用模型,对不同原料的热解过程路线及动力学参数的准确描述有待进一步提高。

4 结论

本文采用数值模拟通过研究反应器内气固流动过程,建立气固相间传热及热解反应动力之间的联系,对玉米秸秆热解过程中物化现象进行模拟。

通过不同流化风风速的对比研究表明:流化风速的变化直接影响鼓泡床内气泡尺寸及流化床空隙率,同时风速的变化决定了反应颗粒的运动轨迹,从而影响其在反应器内的停留时间;流化风风速的变化改变了床内床料颗粒的浓度分布,进而影响玉米秸秆颗粒与流化床间的换热过程,主要体现为热解产物产率分布的差异。同时对模型出口边界条件的不同设定表明,压力出口边界和自由出流边界条件的设定对模拟结果的影响不大。数值模拟结果与实验结果存在一定差异,需进一步细化气固流动模型及相间换热模型以提高模拟结果的准确度。

[参考文献]

- [1] 薛爱军, 潘继红, 田茂诚, 等. 下吸式生物质气化炉数值模拟研究进展[J]. 生物质化学工程, 2016, 50(2): 45—52.
- [1] Xue Aijun, Pan Jihong, Tian Maocheng, et al. Research progress of numerical simulation of downdraft biomass gasifier[J]. Biomass Chemical Engineering, 2016, 50(2): 45—52.
- [2] 张玉, 翟明, 张波, 等. 生物质旋风热解炉气相等温流场数值模拟[J]. 节能技术, 2015, 33(5): 413—419.
- [2] Zhang Yu, Zhai Ming, Zhang Bo, et al. Numerical simulation for the gas-phase isothermal flow field of a biomass cyclone pyrolysis burner[J]. Energy Conservation Technology, 2015, 33(5): 413—419.
- [3] 卢洪波, 马玉鑫, 祖国刚, 等. 生物质与煤共燃温度场的数值模拟[J]. 东北电力大学学报, 2014, 34(1): 1—4.
- [3] Lu Hongbo, Ma Yuxin, Zu Guogang, et al. Numerical simulation of biomass co-firing with coal[J]. Journal of Northeast Dianli University, 2014, 34(1): 1—4.
- [4] 虞君武, 何蓉, 张衍国. 鼓泡流化床中生物质气化的数值模拟[J]. 燃烧科学与技术, 2014, 20(6): 471—477.
- [4] Yu Junwu, He Rong, Zhang Yanguo. Numerical simulation of biomass gasification in a bubbling fluidized bed[J]. Journal of Combustion Science and Technology, 2014, 20(6): 471—477.
- [5] Xue Q, Fox R O. Multi-fluid CFD modeling of biomass gasification in polydisperse fluidized-bed gasifiers[J]. Powder Technology, 2014, 254: 187—198.
- [6] Ranganathan P, Gu S. Computational fluid dynamics modeling of biomass fast pyrolysis in fluidised bed reactors, focusing different kinetic schemes[J]. Bioresource Technology, 2016, 213: 333—341.
- [7] Xiong Q, Xu F, Ramirez E, et al. Modeling the impact of bubbling bed hydrodynamics on tar yield and its fluctuations during biomass fast pyrolysis[J]. Fuel, 2016, 164: 11—17.
- [8] Mellin P, Yang W, Yu X. Comprehensive secondary pyrolysis in fluidized-bed fast pyrolysis of biomass, a fluid dynamics based modeling effort[J]. Energy Procedia, 2015, 66: 281—284.
- [9] Grønli M G, Melaaen M C. Mathematical model for wood pyrolysis: Comparison of experimental measurements with model predictions[J]. Energy & Fuels, 2000, 14(7): 791—800.
- [10] Liu Ronghou, Shen Chenjie, Wang Jiawen. Effect of particle size of corn stalk fast pyrolysis on physicochemical properties of bio-oil[J]. Journal of Biobased Materials and Bioenergy, 2010, 4(4): 1—6.
- [11] Miller RS, Bellan J. A generalized biomass pyrolysis model based on superimposed cellulose, hemicellulose and lignin kinetics[J]. Combustion Science and Technology, 1997, 126: 97—138.
- [12] Miller R S, Bellan J. Numerical simulation of vortex pyrolysis reactors for condensable tar production from biomass[J]. Energy and Fuels, 1998, 12(1): 25—40.
- [13] Min J, Drake J B, Heindel T J, et al. Experimental validation of CFD simulation of a lab-scale fluidized-bed reactor with and without side-gas injection[J]. Particle Technology and Fluidization, 2010, 56: 1434—1446.
- [14] Li T, Grace J, Bi X. Study of wall boundary condition in numerical simulations of bubbling fluidized beds[J]. Powder Technology, 2010, 203: 447—457.

NUMERICAL SIMULATION OF FAST PYROLYSIS PROCESS OF CORN STALK IN BUBBLING FLUIDIZED BEDS

Dong Nanhang¹, Wang Qing¹, Liu Ronghou²

(1. School of Energy and Power Engineering, Northeast Electric Power University, Jilin 132012, China;

2. Biomass Energy Engineering Research Centre, School of Agriculture and Biology, Shanghai Jiao Tong University, Shanghai 200240, China)

Abstract: The numerical simulation was used to describe the fast pyrolysis process of corn stalk in bubbling fluidized beds and predict the product distribution. The gas-solid flow characteristics and heat and mass transfer process in high temperature pyrolysis reactor were deeply realized, and then the optimized design of system operating parameters was carried out. The simulation results show that the superficial velocity determines the trajectory of stalk particles in the reactor. The variation of the average void fraction in the bed can affect the heat exchange process in the bed and form the difference of the yield distribution of pyrolysis products. The comparison of experimental results shows that numerical simulation still needs to be further improved in the accuracy of quantitative analysis.

Keywords: pyrolysis; fluidized beds; biomass; computational fluid dynamics