

生物质成型颗粒管式炉内热解的异维协同模拟

张政清, 张艳玲, 高振强, 孙 鹏, 朱继英, 何 芳

(山东理工大学交通与车辆工程学院, 淄博 255000)

摘 要: 以成型颗粒在卧式管式炉中燃烧时的热解阶段为例,对成型颗粒采用一维壳层模型划分单元,采用 Matlab 软件编程求解;对炉内环境采用二维模型划分单元,用 Fluent 软件计算;计算过程中颗粒和环境间的数据交换采用 C 程序编写的 Matlab 和 Fluent 各自 I/O 函数实现。结果表明,计算和实验数据吻合良好,计算速度快。

关键词: 生物质; 热解; 模拟; 异维; 成型颗粒

中图分类号: TK6

文献标识码: A

0 引 言

生物质是一种清洁的可再生能源,直接燃烧是其重要的利用方式。生物质挤压成型颗粒具有能量密度高、便于储存运输、燃烧设备自动化程度高、燃烧排放低等优势,具有广泛的应用前景^[1]。成型颗粒燃烧特性的实验研究^[2-5]和模拟分析^[6-8]对燃烧设备的设计、改进、污染物控制等具有理论指导意义。在对生物质成型颗粒燃烧进行模拟分析时,由于其燃烧过程包括干燥、热解、挥发分燃烧、炭氧化等阶段,各阶段又包含众多的基元反应^[9],如果对颗粒采用多维模型计算(维数与计算量呈指数关系),其计算量大、耗时长,不利于计算软件在成型颗粒锅炉设备设计、分析方面的应用。采用如图 1 所示的一维壳层模型^[10],对任意形状的颗粒由外向

内以壁厚为 dr 的薄层划分单元,可实现多维问题向一维问题的转化,这种模型既兼顾计算速度又能反映颗粒内部变化,在生物质颗粒各种计算中已取得理想效果^[10-12]。

目前,生物质锅炉燃烧和单颗粒燃烧的数值模拟中,燃料常用零维或一维模型,结合 CFD 商用软件中气相区多维模型进行计算^[6,13,14]。燃料区用 UDF 函数定义一维模型标量及反应方程,气相区用 CFD 软件多维模型模拟,通过边界条件使两者耦合。Fluent 等 CFD 软件在模拟流体流动、传热及反应方面已非常成熟,且有丰富的模型可用。然而其提供的 UDF 函数因形式有限,使用不灵活,在模拟颗粒热化学转化过程时会造成程序编写调试及子程序验证的困难。而像 Matlab、C 语言等程序设计语言,在程序编写及调试方面较为灵活、方便,尤其是 Matlab,以矩阵形式进行数学运算,可快速有效地求解一维壳层模型单元方程组。因此,若采用 Matlab 程序计算燃料内部一维模型,Fluent 软件计算燃料外部环境多维模型,可充分发挥 2 个软件的优势。采用 Matlab 和 Fluent 异维协同计算生物质热化学转化过程的研究鲜见报道。

本文拟通过 Matlab 和 Fluent 协同计算,模拟生物质燃烧过程。基于 2 个软件各自 I/O 函数实现数据交互,达到协同计算的目的,探索 Matlab 和

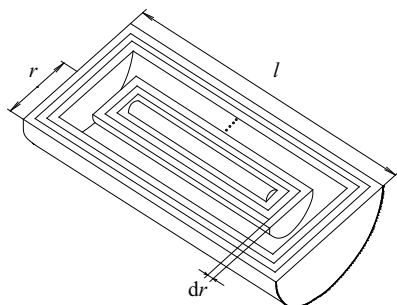


图1 一维壳层模型

Fig. 1 One-dimensional shell model

收稿日期: 2017-04-14

基金项目: 国家自然科学基金(51676115)

通信作者: 何 芳(1972—), 女, 博士、教授、博士生导师, 主要从事生物质能综合利用方面的研究。hf@sdut.edu.cn

Fluent 异维协同计算的方法。作为研究的第一步,以玉米秸成型颗粒在管式炉内燃烧的热解阶段为例,验证模拟思路及方法的可靠性,为进一步研究并利用模型提供基础。

1 问题描述及简化假设

本文模拟计算对象如图 2 所示,直径为 d ,长为 l 的圆柱状单颗粒生物质成型燃料在管式炉内燃烧的热解阶段。石英管的内径为 D ,管长为 L ,中间加热段长为 H 。整个过程管式炉加热段壁温由温控器控制,保持相对恒定。

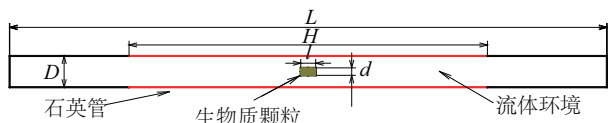


图2 模拟对象

Fig. 2 Modeling configuration

主要简化假设:1)管式炉加热段为恒壁温条件;2)生物质成型颗粒在管内中心位置;3)干燥和热解过程中成型颗粒无收缩变形;4)各物性参数为常数。

2 成型颗粒变化过程数学描述

成型颗粒在管式炉内经历升温、干燥、热解、挥发分燃烧及炭氧化等阶段,其能量守恒方程为:

$$c \frac{\partial (\sum \rho_i T)}{\partial t} = \lambda \frac{\partial^2 T}{\partial x^2} + \sum \frac{\partial \rho_i}{\partial t} H_i \quad (1)$$

边界条件:

$$-\lambda \frac{\partial T}{\partial x} \Big|_{x=\frac{d}{2}} = q_{\text{ext}} \quad (2)$$

$$\frac{\partial T}{\partial x} \Big|_{x=0} = 0 \quad (3)$$

式中, ρ_i ——密度, kg/m^3 ; H_i ——反应热, kJ/kg ; q_{ext} ——边界热流密度, kJ/m^2 。

假设成型颗粒干燥和热解产物快速出流,不考虑炭的氧化阶段,成型颗粒各单元不求解动量方程。对方程中干燥速率采用一级 Arrhenius 方程描述^[8],热解过程采用 3 个平行竞争的反应描述^[10,15],并考虑焦油的二次裂解^[16],干燥速率及各物质产生或消耗速率如式(4)。

$$\frac{\partial \rho_i}{\partial t} = \sum \alpha_i \rho_i k_i e^{-\frac{E_i}{RT}} \quad (4)$$

式中, i ——热解过程各物质,水分、干生物质、挥发分、焦油、残炭; α_i ——物质浓度系数,生成 1,消耗为 -1,不包含 0。

计算中假设各物性参数为常数,水汽化潜热为 $2156.6 \text{ kJ}/\text{kg}$,颗粒比热容为 $1750 \text{ J}/(\text{kg} \cdot \text{K})$,颗粒导热系数为 $0.2 \text{ W}/(\text{m} \cdot \text{K})$,颗粒初始密度为 $1210 \text{ kg}/\text{m}^3$,初始温度为 298 K 。生物质热解反应热为 $-610 \text{ kJ}/\text{kg}$ ^[17]。表 1 列出本文计算过程中使用的动力学参数。

表1 计算过程动力学参数^[9]

Table 1 Kinect parameters used for the simulation^[9]

过程	指前因子/ $\text{kg} \cdot \text{m}^{-3} \cdot \text{s}^{-1}$	活化能/ $\text{kJ} \cdot \text{mol}^{-1}$
干燥	5.13×10^{10}	88.0
干生物质 → 挥发分	1.11×10^{11}	177.0
干生物质 → 焦油	9.28×10^9	149.0
干生物质 → 炭	3.05×10^7	125.0
焦油 → 挥发分	4.28×10^6	107.5
焦油 → 炭	1.00×10^5	107.5

3 模型求解

3.1 颗粒内部单元划分及计算过程

生物质成型颗粒以一维壳层模型由外向内划分为 n 个单元,最外层为第 1 层,最内层为第 n 层,如图 3 所示。单元厚度 dr 的计算如式(5),第 i 个单元内侧表面积为式(6),体积为式(7)。其中第 n 层单元的内侧表面积为 0;第 1 层单元外侧面积为 $A_{0,\text{in}}$ 。

$$dr = \frac{2r}{2n-1} \quad (5)$$

$$A_{i,\text{in}} = 2\pi(r - idr)(r + L - 3idr) \quad (6)$$

$$v_i = dr \frac{A_{i,\text{in}} + A_{i-1,\text{in}}}{2} \quad (7)$$

$$A_{0,\text{in}} = 2\pi r(r + L) \quad (8)$$

在此单元划分下对颗粒能量方程进行离散化,并用 Matlab 编程求解,程序流程见图 4。

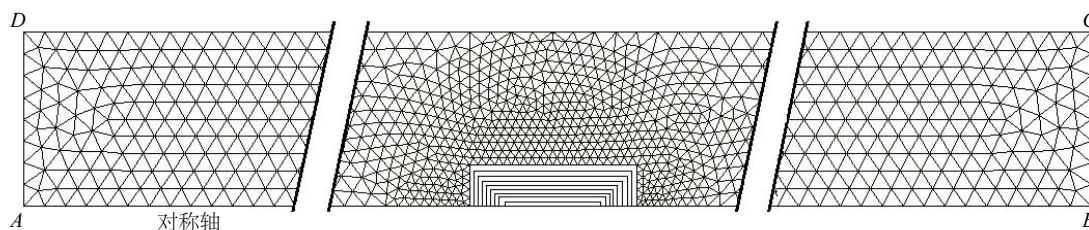


图3 计算模型单元划分

Fig. 3 Simulation model and mesh

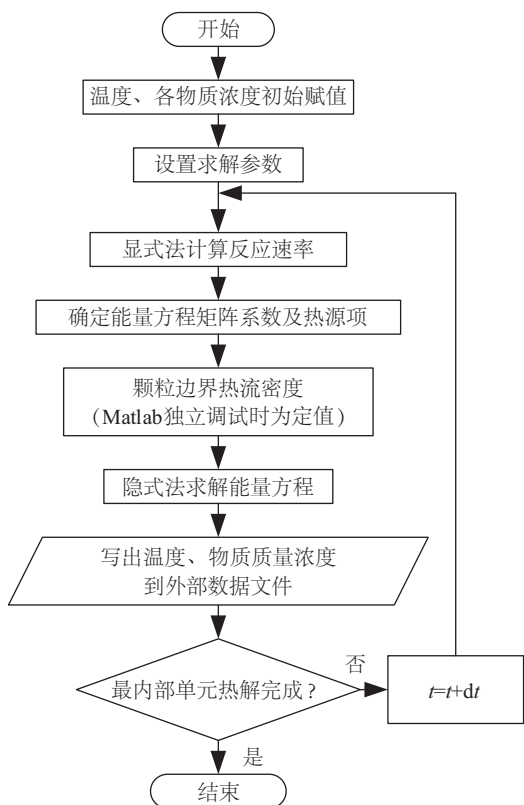


图4 Matlab程序求解流程图

Fig. 4 Flow chart of Matlab code

在颗粒边界定热流密度 ($2 \times 10^4 \text{ W/m}^2$) 条件下,对壳层模型单元数量由 10 逐步增加到 40,以验证单元独立性,发现单元数量为 30 和 40 时温度计算误差均不超过 1%。在颗粒单元数量为 30 的条件下,时间步长由 1.0 s 逐步减小到 0.1 s 以验证步长独立性,发现时间步长 0.5 s 与 0.1 s 时温度计算误差均不超过 1%。本文模型单元数量选用 30,时间步长设为 0.5 s,对 Matlab 程序进行独立调试。

3.2 炉内单元划分及计算方法

对于炉内空间区域,用 Gambit 软件非结构化划

分单元,如图 3 二维区域所示。颗粒边界周围局部加密,其边界节点间距为普通边界的 1/3;对颗粒两侧的轴边界,以颗粒边界为起点向两侧 30 mm 内以比例因子 1.03 划分网格。炉内二维区域采用 Fluent 基于压力的非稳态求解器求解;湍流模型选择标准 $k-\varepsilon$ 模型,辐射计算选用 DO 模型;为了获得较好的收敛性和精度,对控制方程压力项采用 Standard 格式离散,其他项采用一阶迎风格式离散就能获得理想效果;速度和压力耦合采用 SIMPLE 算法;模型选用速度入口 (velocity inlet) 和自由出口 (out flow)。入口速度为 0.0176 m/s (依据流量 350 NL/h 换算得到),温度为 298 K。管内流体为空气。Fluent 独立调试时,颗粒边界设为定壁温边界条件。

模型总网格数量由 10370 增加到 21540,时间步长为 0.5 s,以验证网格独立性,发现网格数量在 16600 和 18532 时温度计算误差不超过 1%。

3.3 Matlab 和 Fluent 协同计算

颗粒燃料实际燃烧过程中表面温度和热流密度边界条件并非定值,而是随燃烧过程及周围环境变化的。这个表面温度和热流密度边界条件分别由 Matlab 和 Fluent 协同计算得到。颗粒内部模型与炉内环境模型协同计算主要实施方案为:1) Matlab 程序独立运行时的定热流密度边界条件换成通过读写函数读取 Fluent 计算进程中得到的热流密度数据,此热流密度由热空气与成型颗粒表面存在温差而产生;2) Fluent 独立运行时颗粒边界定壁温条件换成通过编写 UDF 函数读取 Matlab 计算所得最外层单元的温度数据;3) 2 个计算过程通过模型物理时间进行协调。协同计算流程如图 5 所示。

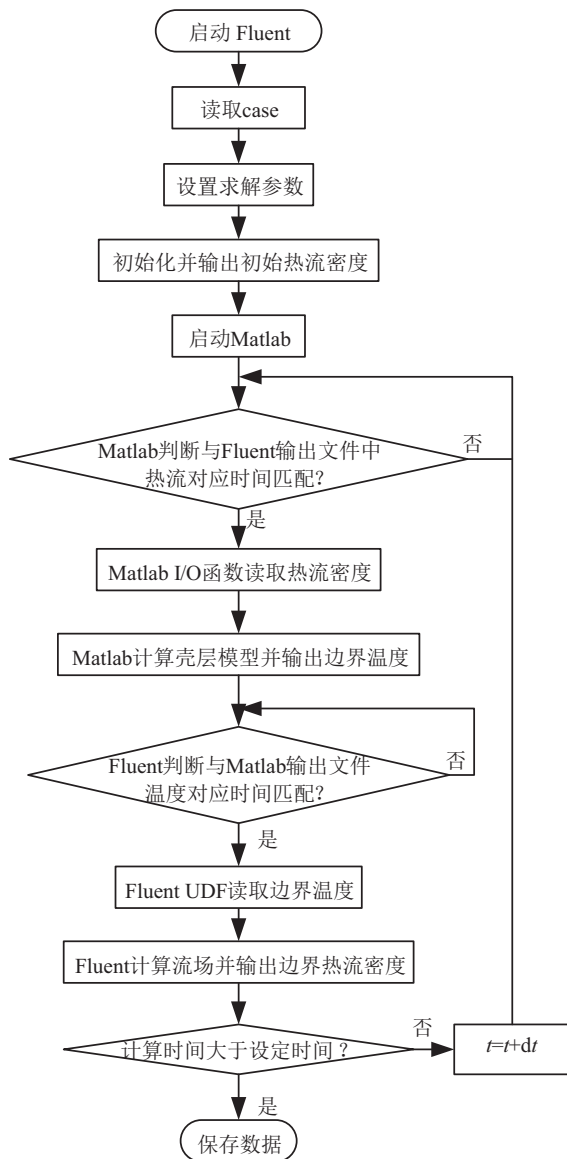


图5 整体计算流程图
Fig. 5 Simulation flow chart

Matlab 与 Fluent 协同计算时, 在加热壁温

600 ℃下, 验证整体模型时间步长及网格独立性。发现, 对比壳层模型划分 30 个单元、二维模型划分 18532 个网格与壳层模型划分 40 个单元、二维模型划分 21540 个网格, 温度计算结果误差均不到 1%; 时间步长 0.1 s 和 0.5 s 计算结果误差均不到 1%。本文模型计算选择时间步长 0.5 s, 壳层模型 30 个单元, 二维模型 18532 个网格。

3.4 模型效率分析

使用 AMD Athlon(tm)x2 240 型 CPU 计算所建模型, 加热壁温设置为 600 ℃时, 计算 180 s 燃烧过程只需 10 min, 计算进程使用内存约 108 MB。本文模型计算速度较快, 所占内存较少。

4 模拟结果及实验验证

4.1 实验

实验在卧式管式炉(KSY-6D-16)中实施, 实验装置见图 6。实验物料为 2016 年淄博恒生锅炉厂提供的玉米秸秆挤压成型颗粒, 形状为 $\Phi 10 \text{ mm} \times 40 \text{ mm}$ 的圆柱状, 每个质量约为 3.8 g, 其工业分析及元素分析如表 2 所示。

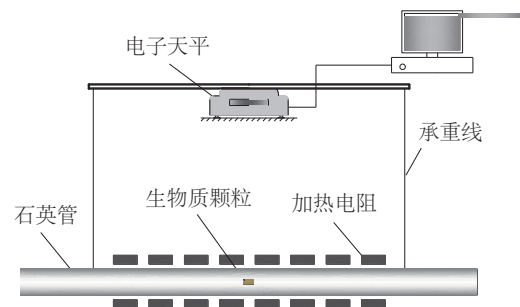


图6 实验设备原理图

Fig. 6 Schematic diagram of experimental equipment

表2 玉米秸成型颗粒工业分析及元素分析

Table 2 Results of proximate and ultimate analysis of corn-stover pellet

工业分析/%				元素分析/%				低位热值/ $\text{MJ} \cdot \text{kg}^{-1}$
M_{ad}	V_{ad}	FC_{ad}	A_{ad}	[C]	[H]	[O]	[N]	
8.6	64.8	14.9	11.7	40.4	5.7	39.2	2.5	15.5

如图 6 所示, 当管内升温到实验值后迅速将载有成型颗粒的小瓷舟放入到石英管中心位置。石英管内通风量为 350 NL/h。采用电子天平(OhausCP2012)连续称量质量, 计算机每隔 5 秒记录一次数据。

4.2 模拟与实验对比验证

图 7 为各加热壁温下生物质颗粒失重曲线计算结果与实验值的对比。较低温度下所建模型计算值与实验值吻合度较好。经计算发现, 500、600 和 700 ℃加热壁温下失重数据的最大误差不超过

15%。加热壁温为 800 ℃时失重数据最大误差不超

过 20%。

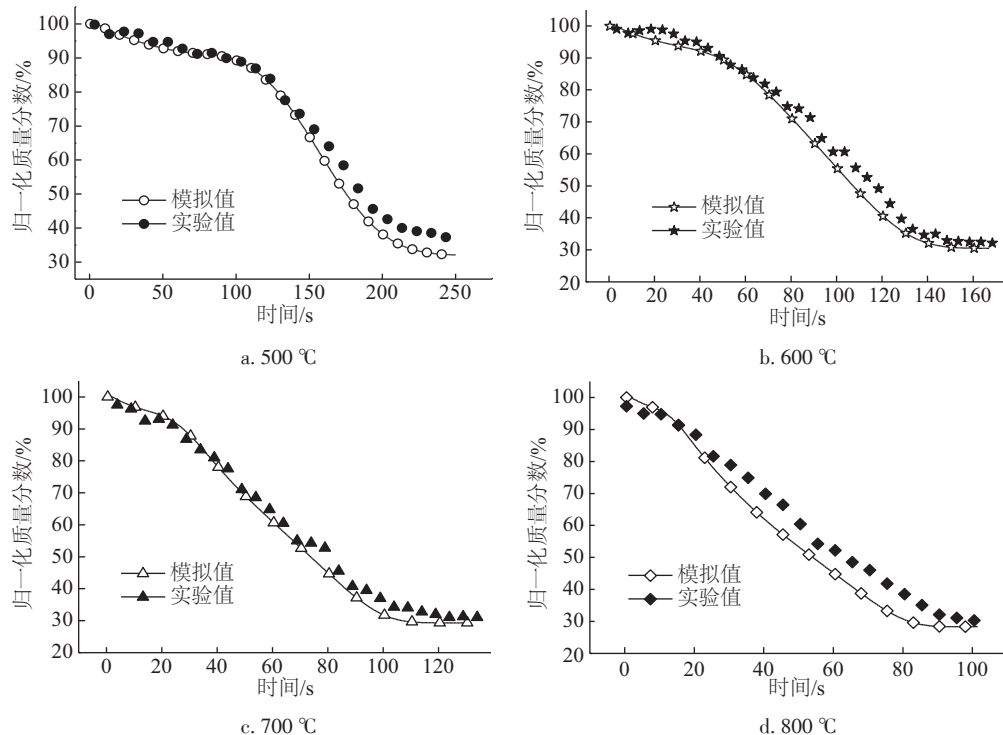


图 7 模拟与实验对比验证

Fig. 7 Comparison between simulations and experiments

4.3 模型提供其他信息

采用 Matlab 和 Fluent 协同模拟还可得到颗粒内部和流体环境的其他信息,特别是颗粒内部,可自行在 Matlab 程序中添加输出项,这里以温度和热解过程产物为例说明。

4.3.1 温度场

炉内加热壁温 600 ℃下不同时刻石英管内及颗粒内部温度分布云图(颗粒局部放大)如图 8 所示。从图 8 可看出,石英管加热段温度较高,可达到加热壁温。由于颗粒放入后石英管左端入口通入空气,空气的流动影响管内流场及温度场,导致炉内温度场左右呈不对称分布。由于未考虑挥发分燃烧,当常温颗粒放入炉内时,80 s 之前颗粒位置周围温度相对较低,之后恢复到接近壁温。干燥、热解过程的吸热导致颗粒内部温度热解完成后才能逐渐升到加热壁温。

4.3.2 热解产物质量分数

图 9 以 600 ℃加热壁温为例,给出热解过程中水分、焦油、挥发分及残炭相对原颗粒的质量分数随时间的变化曲线,以说明模型在模拟过程中可反

映各物质变化细节,可应用于今后对组分变化、灰分特性、生物质结焦等方面的研究。

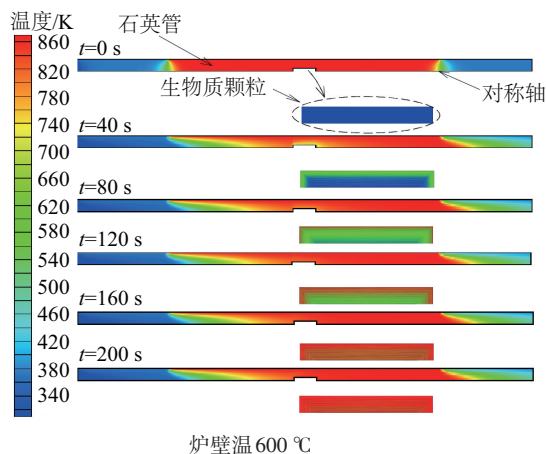


图 8 温度场随时间变化云图

Fig. 8 Contours of temperature at different time

从图 9 可看出,生物质成型颗粒首先经历干燥阶段,然后开始热解。0~40 s 颗粒外层干燥后迅速升温到热解温度,而内层还处于干燥阶段,导致出现干燥末尾与热解始端重叠现象。60~120 s 焦油产量与消耗量持平,最大焦油量可保持相对稳定。

由各物质变化曲线可更深入地了解生物质成型颗粒的热解过程。

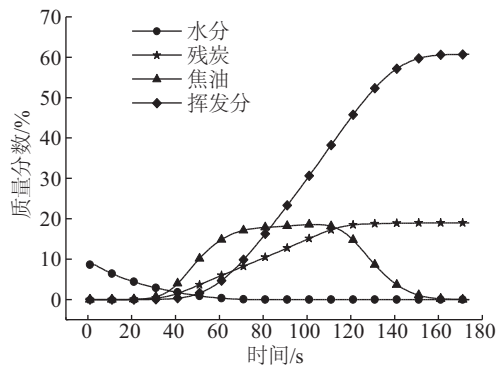


图9 热解过程中各物质质量分数变化曲线

Fig. 9 Mass fraction of composition during pyrolysis

4.3.3 产物随加热壁温变化规律

图 10 所示为各加热壁温下残炭质量分数随时间的变化曲线。随着加热壁温的上升(升温速率上升),残炭的总产量略有下降。说明在干生物质热解生成挥发分、焦油、残炭的竞争反应,以及焦油二次裂解的竞争反应中,升温速率的增大会导致干生物质热解及焦油裂解过程生成残炭量减小。

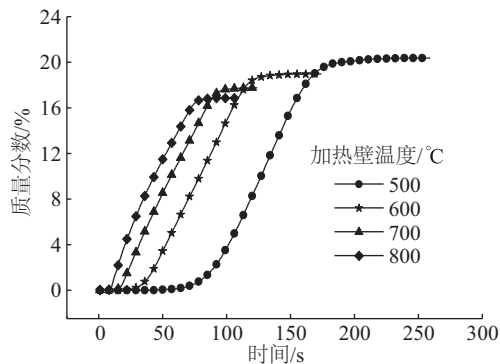


图10 各温度下残炭总产量曲线

Fig. 10 Mass fraction of char at different temperatures

5 结果与讨论

本文采用成型颗粒内部一维壳层模型基于 Matlab 独立编程求解,并与 Fluent 中多维模型协同计算的方法,模拟成型颗粒燃烧的热解阶段。通过计算及实验验证,发现 Matlab 和 Fluent 通过数据交换实现协同计算的模拟方法是有效的;模型计算速度快,所占内存较低。模型可详细分析颗粒内部各物质变化过程,并可对子模型进行试验验证。下一步工作将用此方法研究生物质成型颗粒在管式炉

及锅炉内的整个燃烧过程。

Matlab 和 Fluent 异维协同计算的模拟方法在一维模型编程求解方面灵活方便,不受 CFD 软件限制,自由度高,工作量小。此方法并不局限于模拟生物质颗粒的燃烧过程,还可推广应用于其他领域。例如模拟谷物在热空气中的干燥过程中,谷物颗粒形状不规则,用多维模型对其求解较复杂,可用一维壳层模型独立编程求解,然后再耦合外部热空气多维模型进行计算;模拟不规则形状的金属零件在热流体中的热处理过程中,金属零件也可用一维壳层模型独立编程求解,再耦合外部热流体多维模型进行计算。

[参考文献]

- [1] García-Maraver A, Popov V, Zamorano M. A review of European standards for pellet quality [J]. Renewable Energy, 2011, 36(12): 3537—3540.
- [2] 彭好义, 姚昆, 曹小玲, 等. 两种不同生物质成型燃料燃烧特性实验研究 [J]. 太阳能学报, 2016, 37(4): 1002—1008.
- [2] Peng Haoyi, Yao Kun, Cao Xiaoling, et al. Experimental research of combustion characteristics of two kinds of biomass pellets [J]. Acta Energetica Sinica, 2016, 37(4): 1002—1008.
- [3] Rhen C, Ohman M, Gref R, et al. Effect of raw material composition in woody biomass pellets on combustion characteristics [J]. Biomass and Bioenergy, 2007, 31(1): 66—72.
- [4] 罗娟, 侯书林, 赵立欣, 等. 典型生物质颗粒燃料燃烧特性试验 [J]. 农业工程学报, 2010, 26(5): 220—226.
- [4] Luo Juan, Hou Shulin, Zhao Lixin, et al. Experimental study on combustion and emission characteristics of biomass pellets [J]. Transactions of the CSAE, 2010, 26(5): 220—226.
- [5] 姚宗路, 吴同杰, 赵立欣, 等. 生物质成型燃料燃烧挥发性有机物排放特性试验 [J]. 农业机械学报, 2015, 46(10): 235—240.
- [5] Yao Zonglu, Wu Tongjie, Zhao Lixin, et al. Emission characteristic of VOCs from biomass molding fuel combustion [J]. Transactions of the Chinese Society for Agricultural Machinery, 2015, 46(10): 235—240.
- [6] Gómez M A, Porteiro J, de la Cuesta D, et al. Numerical simulation of the combustion process of a pellet-drop-feed boiler [J]. Fuel, 2016, 184: 987—

- 999.
- [7] Nunes L J R, Matias J C O, Catalão J P S. Mixed biomass pellets for thermal energy production: A review of combustion models[J]. *Applied Energy*, 2014, 127: 135—140.
- [8] Gómez M A, Porteiro J, Patiño D, et al. Eulerian CFD modelling for biomass combustion. Transient simulation of an underfeed pellet boiler[J]. *Energy Conversion and Management*, 2015, 101: 666—680.
- [9] Sousa N, Azevedo J L T. Model simplifications on biomass particle combustion[J]. *Fuel*, 2016, 184: 948—956.
- [10] Thunman H, Leckner B, Niklasson F, et al. Combustion of wood particles-A particle model for eulerian calculations[J]. *Combustion and Flame*, 2002, 129(1-2): 30—46.
- [11] Porteiro J, Granada E, Collazo J, et al. A model for the combustion of large particles of densified wood[J]. *Energy & Fuels*, 2007, 21(6): 3151—3159.
- [12] He F, Behrendt F. A new method for simulating the combustion of a large biomass particle-A combination of a volume reaction model and front reaction approximation[J]. *Combustion and Flame*, 2011, 158(12): 2500—2511.
- [13] Gómez M A, Comesaña R, Feijoo M A Á, et al. Simulation of the effect of water temperature on domestic biomass boiler performance[J]. *Energies*, 2012, 5(1): 1044—1061.
- [14] Shin D, Choi S. The combustion of simulated waste particles in a fixed bed[J]. *Combustion and Flame*, 2000, 121(1-2): 167—180.
- [15] Porteiro J, Granada E, Collazo J, et al. A model for the combustion of large particles of densified wood[J]. *Energy & Fuels*, 2007, 21(6): 3151—3159.
- [16] Lu H, Robert W, Peirce G, et al. Comprehensive study of biomass particle combustion[J]. *Energy & Fuels*, 2008, 22(4): 2826—2839.
- [17] Porteiro J, Míguez J L, Granada E, et al. Mathematical modelling of the combustion of a single wood particle[J]. *Fuel Processing Technology*, 2006, 87(2): 169—175.

HETERO-DIMENSION SIMULATION OF BIOMASS PELLET PYROLYSIS IN TUBE FURNACE

Zhang Zhengqing, Zhang Yanling, Gao Zhenqiang, Sun Peng, Zhu Jiying, He Fang

(School of Transportation and Vehicle Engineering, Shandong University of Technology, Zibo 255000, China)

Abstract: Taking pyrolysis stage of biomass pellet in horizontal tube furnace burning as an example, using one-dimensional shell model for pellet to divide unit and calculating this model by software Matlab, coupled with two dimensional CFD model for inner furnace environment, the pyrolysis stage of a corn-stover-pellet burning in tube furnace was simulated used the coupled model. The data exchange between the two programs was realized by the I/O function of Matlab and Fluent. Results show that the simulation results are in good agreement with the experimental data. And the calculation cost is low.

Keywords: biomass; pyrolysis; simulation; hetero-dimension; pellets