

DOI: 10.11949/0438-1157.20200613

基于CPFD方法的流化床生物质气化数值模拟

任喜熙, 陈祁, 杨海平, 张世红, 王贤华, 陈汉平

(华中科技大学煤燃烧国家重点实验室, 湖北 武汉 430074)

摘要: 基于计算颗粒流体动力学 (CPFD) 建立了三维鼓泡流化床水蒸气-空气混合气化的数值模型, 并进行了模型验证, 结果表明模拟和实验具有良好的一致性。在该模型的基础上, 研究了气化炉内气体分布以及温度分布; 同时探究了生物质属性 (颗粒粒径、含水率、种类) 以及操作条件 (气化温度、床料高度) 对气化特性的影响。结果表明, 生物质颗粒粒径对气化性能的影响存在一个最优值, 平均粒径为 0.6 mm 是最佳的; 较高的含水率会降低可燃气体产量, 不利于气化反应的进行; 四种生物质中, 锯末气化的效率最高、可燃气体产量最大、气体热值最高, 稻壳仅次于锯末但其碳转化率高于锯末; 提高气化温度可以增加可燃气体的比例、提高气化效率; 而初始床层高度的变化可以改变 H_2/CO 的比例。本实验为生物质水蒸气/空气气化提供了理论参考, 有助于生物质原料的选取和处理, 也有助于气化炉的放大和优化。

关键词: 生物质; 气化; 数值模拟; CPFD; 流化床

中图分类号: TK 6

文献标志码: A

文章编号: 0438-1157 (2020) 12-5763-11

Numerical simulation of 3D fluidized bed biomass gasification based on CPFD

REN Xixi, CHEN Qi, YANG Haiping, ZHANG Shihong, WANG Xianhua, CHEN Hanping

(State Key Laboratory of Coal Combustion, Huazhong University of Science and Technology, Wuhan 430074, Hubei, China)

Abstract: Based on computational particle fluid dynamics (CPFD), a three-dimensional bubbling fluidized bed steam-air mixed gasification numerical model was established, and it was verified with experiment trials. The results show that the simulation and experiment have good consistency. Based on the model, the gas distribution and temperature distribution in the gasifier were studied; meanwhile, the biomass properties (particle size, water content, types) and operating conditions (gasification temperature, bed height) were investigated. The results show that there is an optimal value for the impact of biomass particle size on gasification performance, with an average particle size of 0.6 mm being the best; a higher water content will reduce the output of combustible gas and is not conducive to the gasification reaction. Among the four types of biomass, sawdust gasification has the highest efficiency, the largest combustible gas production, and the highest gas calorific value. Rice husk is second only to sawdust but its carbon conversion rate is higher than that of sawdust; increasing the gasification temperature can increase the proportion of combustible gas and increase gasification efficiency; while the change of initial bed height can change the ratio of H_2/CO . This experiment provides a theoretical reference for biomass steam/air gasification, which is helpful for the selection and processing of biomass raw materials, and also facilitates the amplification and

收稿日期: 2020-05-19 修回日期: 2020-07-27

通信作者: 陈汉平 (1962—), 男, 教授, fbghust@163.com

第一作者: 任喜熙 (1994—), 男, 硕士研究生, renxixi1994@qq.com

基金项目: 国家重点研发计划项目 (2019YFB1503901); 国家自然科学基金项目 (52076100)

引用本文: 任喜熙, 陈祁, 杨海平, 张世红, 王贤华, 陈汉平. 基于 CPFD 方法的流化床生物质气化数值模拟[J]. 化工学报, 2020, 71(12): 5763–5773

Citation: REN Xixi, CHEN Qi, YANG Haiping, ZHANG Shihong, WANG Xianhua, CHEN Hanping. Numerical simulation of 3D fluidized bed biomass gasification based on CPFD[J]. CIESC Journal, 2020, 71(12): 5763–5773

optimization of the gasifier.

Key words: biomass; gasification; numerical simulation; CPFD; fluidized bed

引 言

生物质气化被认为是一种很具前景的清洁能源利用技术^[1]。流化床作为一种燃料适应性广、效率高、气固混合充分以及温度场均匀的反应器,已经被广泛用于生物质气化等热转换过程,国内外学者也进行了大量的实验和模拟研究^[2-7]。目前数值模拟中的半经验和经验模型可以替代实验进行预测^[8],随着计算流体动力学(CFD)的发展,已经可以较准确地预测流化床生物质气化^[4,7]。

气化过程大多是吸热的,通常通过燃烧的方式来提供气化反应所需的热量^[9],所以常使用空气作为气化剂,但是空气气化热值较低,经济效益较差,而水蒸气气化的合成气热值高,因此水蒸气混合空气气化具有较高的应用价值^[10]。Pauls等^[11]和车德勇等^[12]应用 Aspen Plus 建立了生物质在空气-水蒸气下的气化模型,并探究了空气当量比和水蒸气与生物质的比对气化特性的影响;Gerber等^[4]和虞君武等^[2]建立了鼓泡流化床的欧拉双流体(TFM)模型,同时对初始床高、木屑进料速率、热边界条件以及初级和二次热解动力学进行了探究,结果表明初始床高和木屑进料速率对气体组分的影响相对较小;Zhao等^[13]基于CFD-DEM方法在超临界水的条件下探究了壁温以及流速对生物质气化反应的影响。然而,前人的工作主要集中在二维,而二维模型忽略了一个维度的物理变化,虽然可以较精准地描述实验现象,但是对流化床反应器,炉内颗粒和流体的运动存在各向异性的脉动,三维模型模拟可以实现更精确和更精细的模拟^[14]。

计算颗粒流体动力学(CPFD)方法因为可以模拟流态化过程中的大量颗粒而被广泛关注,其具有以下优点^[7,15]:(1)对于整个反应过程进行模拟,描述颗粒的详细粒径分布;(2)无须人为区分流化床的稀相区和密相区;(3)对属性相同的颗粒打包处理成“计算颗粒”,可以处理 10^{16} 数量级别的颗粒;(4)可以定义颗粒的组分以及准确地追踪颗粒的运动和化学反应特性,既保证了计算精度又能提高计算效率。Di Nardo等^[15]和Xie等^[16]对于煤气化的研究表明,CPFD方法可精确模拟流化床气化反应的产物分布,对于形态多样、反应复杂的生物质颗粒来

说,CPFD方法在处理三维模型中颗粒运动、化学反应方面极具优势,因此可将该方法引入到流化床生物质气化的研究中。

因此,为探究生物质属性和操作条件对气化特性的影响,寻找气化反应的最佳工况,本研究将采用CPFD方法建立鼓泡流化床的三维数值模型,详细描述床料颗粒和生物质颗粒的粒径分布,考虑生物质空气-水蒸气气化的热解脱挥发分、焦炭燃烧气化反应以及均相气体反应。探究气化炉内气体分布以及温度分布,并进一步探究生物质颗粒粒径、含水率、种类以及床层高度和气化温度对生物质气化特性的影响。

1 实验的物理模型与数值模型

1.1 气化炉反应器结构

本研究所使用的实验设备是实验室规模的鼓泡流化床,物理模型和实验数据均来自文献^[17]。几何模型简化为直径为50 mm、高度为500 mm的三维气化炉,如图1所示。生物质通过2个螺旋给料器送入炉膛中,进料口离底部50 mm高、直径为40 mm;气化介质从气化器底部供入,空气经预热器预热到60℃,水蒸气通过蒸汽产生器和加热器加热到200℃;合成气从气化炉顶部排出。气化器底部为单个穿孔型的布风板,用4个2.0 kW的电加热线圈加

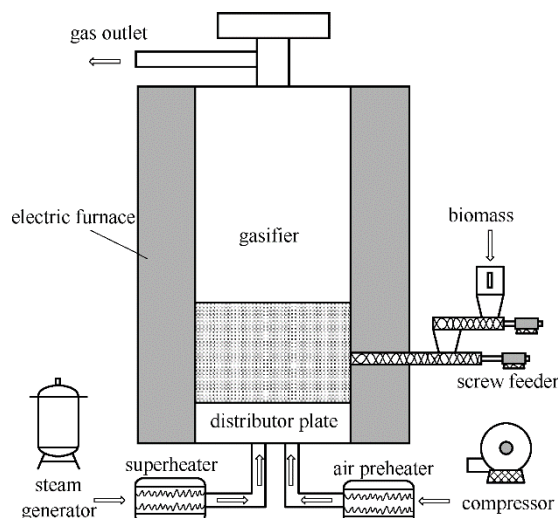


图1 鼓泡流化床气化反应器示意图

Fig.1 Schematic diagram of bubbling fluidized bed gasification reactor

热,气化温度维持在800℃,详细的气化炉结构和实验数据见文献^[18]。生物质的工业分析和元素分析如表1所示。

1.2 基于CPFD方法的数学模型

CPFD方法基于单元内源项颗粒群法(MP-PIC)^[19],流体相通过Navier-Stokes方程以及离散相颗粒对流体相的作用进行描述,气相湍流模型采用大涡(LES)模拟的方法(适用于三维模型),大尺度的涡结构采用直接求解N-S方程,小尺度的涡结构采用Smagorinsky模型^[20]计算;颗粒采用拉格朗日框架下的MP-PIC方法描述,对属性相同的颗粒进行打包处理,形成“计算颗粒”^[18-19]。气固两相之间的阻力模型采用Gidaspow模型^[21]。在CPFD方法中,颗粒的密度是保持不变的,所以颗粒相因化学反应而质量减少必然导致颗粒直径的减小。主要的控制方程概述如表2所示。

1.3 化学反应模型

生物质干燥过程迅速,因此假设生物质中的水分在进料口瞬间蒸发,水分以水蒸气的形式进入气化炉,即不考虑生物质干燥模型。主要考虑生物质的热解模型、焦炭燃烧气化模型以及气相反应模型。

1.3.1 热解脱挥发分模型 生物质热解反应是一个非常复杂的反应过程,在实验中采用简化的单方程模型,不考虑生物质中少量的硫元素和氮元素的影响,同时高碳烃类含量较低也不予考虑,轻烃类产物都认为是CH₄。由于流化床内传热速率快、气固流动充分,热解反应的反应速率比其他反应速率高几个数量级^[6],因此假设热解在整个颗粒中均匀发生,且在进料口瞬间完成。热解脱挥发分化学方程式如下:

$$\begin{aligned} \text{Biomass} &= Y_{\text{Char}} + Y_{\text{Volatile}} + Y_{\text{Moisture}} + Y_{\text{ash}} \\ \text{Volatile} &= n_{\text{CO}_2} + n_{\text{CO}} + n_{\text{H}_2} + n_{\text{CH}_4} + n_{\text{H}_2\text{O}} \end{aligned} \quad (1)$$

式中, Y 为产率,%; n 为热解脱挥发分后产生气体的质量分数。其系数主要通过两种方法确定:(1)通过热解实验确定,本实验中采用的就是由Loha等^[17-18]以及在固定床上的热解实验获得的数据;(2)主要组分通过Loison-Chovin模型^[22-24]计算,再通过元素分析数据确定其他组分含量。

1.3.2 气固反应 生物质热解后的焦炭燃烧、气化建模主要考虑:(1)焦炭燃烧反应;(2)水蒸气气化反应;(3)CO₂气化反应;(4)甲烷化反应。普遍认为甲烷化反应的速度远远低于蒸汽气化^[4],非均相化学反应方程式和化学反应速率建模如表3所示。

表1 稻壳的工业分析和元素分析

Table 1 Proximate analysis and ultimate analysis of rice husk

元素分析/(%,mass, dry)					工业分析/(%,mass, dry)				HHV/(MJ/kg)
C	H	N	S	O	FC	V	M	Ash	
38.43	2.97	0.49	0.07	36.36	14.99	55.54	9.95	19.52	15.68

表2 控制方程^[18-19,21]

Table 2 Governing equations^[18-19,21]

名称	控制方程
连续性方程	$\frac{\partial}{\partial t}(\alpha_g \rho_g) + \nabla \cdot (\alpha_g \rho_g u_g) = \delta \dot{m}_s, \quad \delta \dot{m}_s = - \iiint \frac{dm_s}{dt} dm_s du_s dT_s$
动量方程	$\frac{\partial}{\partial t}(\alpha_g \rho_g u_g) + \nabla \cdot (\alpha_g \rho_g u_g u_g) = -\alpha_g \nabla p + \alpha_g \rho_g g + \nabla \cdot \tau_g + F$
组分输运方程	$\frac{\partial}{\partial t}(\alpha_g \rho_g Y_{g,i}) + \nabla \cdot (\alpha_g \rho_g Y_{g,i} u_g) = \nabla \cdot (\alpha_g \rho_g D_{g,i} Y_{g,i}) + \delta \dot{m}_{s,i} + \delta \dot{m}_{s,i}$
能量守恒方程	$\frac{\partial}{\partial t}(\alpha_g \rho_g h_g) + \nabla \cdot (\alpha_g \rho_g h_g u_g) = \alpha_g \left(\frac{\partial p}{\partial t} + u_g \cdot \nabla p \right) + \varphi - \nabla \cdot (\alpha_g q) + \dot{Q} + S_h + \dot{q}_D$
颗粒运动方程	$A = \frac{du_s}{dt} = D_s(u_g - u_s) + g - \frac{1}{\alpha_s \rho_s} \nabla \tau_s - \frac{\nabla p}{\rho_s} + F_s$
颗粒碰撞模型	$\tau_s = \frac{10P_s \alpha_s^\beta}{\max[(\alpha_{cp} - \alpha_s), \delta(1 - \alpha_s)]}$
颗粒能量传递模型	$m_s C_v \frac{dT_s}{dt} = \sum_{j=1}^{N_p} Q_{ij} + Q_{sg} + Q_{radi} + Q_{reac}$

表3 非均相动力学参数及其表达式^[18-19]Table 3 Heterogeneous kinetic parameters and expressions^[18-19]

反应名称	化学方程式	化学反应速率表达式
焦炭燃烧 R_1	$C + O_2 \longrightarrow CO_2$	$R_1 = 5.957 \times 10^2 T \exp\left(\frac{-17975}{T}\right) \frac{6}{d_p} [O_2]$
二氧化碳气化 R_2	$C + CO_2 \longrightarrow 2CO$	$R_2 = 1.272 m_s T \exp\left(\frac{-1.88 \times 10^8}{RT}\right) [CO_2] -$ $1.0436 \times 10^{-4} m_s T^2 \exp\left(\frac{-1.97 \times 10^7}{RT} - 20.92\right) [CO]^2$
水蒸气气化 R_3	$C + \beta H_2O \longrightarrow (1 - \beta)CO + (\beta - 1)CO_2 + \beta H_2$	$R_3 = 1.272 m_s T \exp\left(\frac{-1.88 \times 10^8}{RT}\right) [H_2O] -$ $1.0436 \times 10^{-4} m_s T^2 \exp\left(\frac{-5.25 \times 10^7}{RT} - 17.29\right) [CO]$
甲烷化反应 R_4	$C + 2H_2 \longrightarrow CH_4$	$R_4 = 1.368 \times 10^{-3} m_s T \exp\left(\frac{-8087}{T} - 7.087\right) [H_2] -$ $0.151 m_s T^{0.5} \exp\left(\frac{-13578}{T} - 0.372\right) [CH_4]^{0.5}$

1.3.3 均相反应 除了非均相反应外,还有许多气体之间发生的反应。它们是热解脱挥发分过程中产生的气体与气化反应产物气体的反应,挥发性气体的燃烧和重整对合成气组成以及气化特性有很大影响。化学反应方程式以及反应动力学参数如表4所示。在均相反应中,只有水煤气转化反应被模拟为平衡反应,该反应正反应为放热反应,在较低温度下有利于产生 CO_2 和 H_2 ,在较高温度下有利于产生 CO 和 H_2O ^[26]。

1.4 模拟实验条件的设定

本实验采用的 Barracuda 软件,是由美国 CPFD Software 公司开发的专门用于模拟流态化过程及化学反应的软件包。具体的边界参数设置如表5所示,参数的取值参考了文献^[7,15,18,27-29]。壁面温度设定为 $800^\circ C$,初始状态下填充 150 mm 高的 SiO_2 沙粒,初

始堆积体积分数为 0.45,粒度分布如表6所示。如图2所示,在 15 s 后出口气体的质量流率基本保持不变,达到了动态平衡,因此选取 15 s 后的平均数据进行进一步探究。

2 结果与讨论

2.1 网格无关性验证

本实验的模型网格通过尺寸自适应的笛卡儿网格划分。在相同条件下,使用 4286、8928、12784 和 15982 个计算网格分别进行模拟实验,取出口气体的摩尔分数进行比较。一般而言,网格数量越多,预测的准确性就越高。如图3所示,在网格数量达到 8928 个以上时,出口气体的摩尔分数显示出良好的一致性,而网格数量为 4286 个时与其他数量网

表4 均相动力学参数及其表达式^[6,18-19,25]Table 4 Homogeneous kinetic parameters and their expressions^[6,18-19,25]

反应名称	化学方程式	化学反应速率表达式
一氧化碳燃烧 R_5	$CO + 0.5O_2 \longrightarrow CO_2$	$R_5 = 5.62 \times 10^{12} \exp\left(\frac{-133031}{RT}\right) [CO] [O_2]^{0.5}$
氢气燃烧 R_6	$H_2 + 0.5O_2 \longrightarrow H_2O$	$R_6 = 5.159 \times 10^{15} T^{-1.5} \exp\left(\frac{-28517}{RT}\right) [O_2] [H_2]^{1.5}$
甲烷燃烧 R_7	$CH_4 + 2O_2 \longrightarrow CO_2 + 2H_2O$	$R_7 = 3.552 \times 10^{11} T^{-1} \exp\left(\frac{-130530}{RT}\right) [O_2] [CH_4]$
甲烷与蒸汽反应 R_8	$CH_4 + H_2O \longrightarrow 3H_2 + CO$	$R_8 = 3.0 \times 10^8 \exp\left(\frac{-125000}{RT}\right) [H_2O] [CH_4]$
水煤气转化反应 R_9	$CO + H_2O \rightleftharpoons CO_2 + H_2$	$R_9 = 7.68 \times 10^{10} T \exp\left(\frac{-304641}{RT}\right) [CO]^{0.5} [H_2O] -$ $6.4 \times 10^9 T \exp\left(\frac{-326425.7}{RT}\right) [H_2]^{0.5} [CO_2]$

表5 模拟的边界条件和参数^[7,15,18,27-29]Table 5 Simulated boundary conditions and parameters^[7,15,18,27-29]

参数	数值	参数	数值
生物质入口质量流率/(kg/h)	0.3	时间步长(Δt)/s ⁻¹	0.0001
生物质颗粒直径/mm	0.25~0.35	粒子与壁面的法线动量保留系数, e_n	0.3
生物质颗粒密度/(kg/m ³)	750	粒子与壁面的切线动量保留系数, e_t	0.99
焦炭密度/(kg/m ³)	1300	固相应力模型的无量纲常数, β	3
沙粒密度/(kg/m ³)	2300	固相应力模型的无量纲常数, σ	10 ⁻⁸
气化温度/°C	800	固相最大堆积密度下的体积分数, α_{cp}	0.6
压力/Pa	101325	碰撞最大动量重定向, ξ	40%

表6 沙粒粒径分布

Table 6 Sand particle size distribution

Size/ μm	Mass fraction/%
<250	2.5
250—400	8.3
400—500	18.7
500—600	56.5
600—700	9.4
>700	4.6

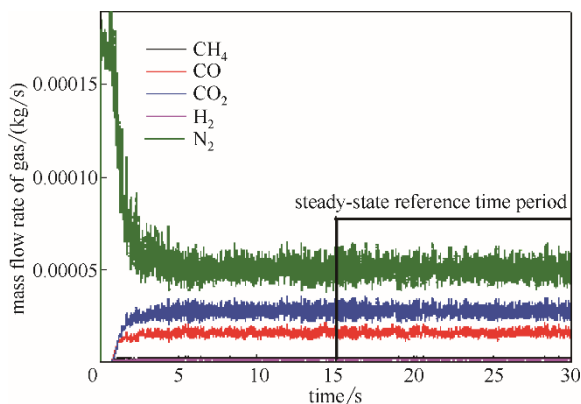


图2 出口气体质量流率随时间的变化

Fig.2 Change of outlet gas mass flow rate with time

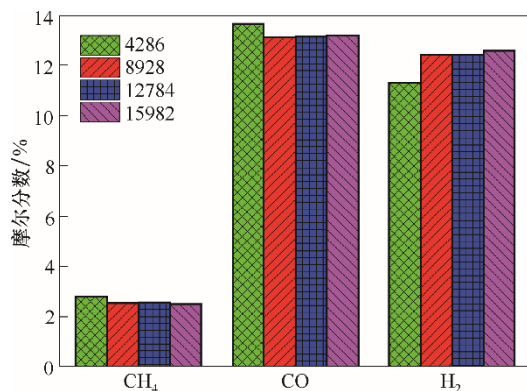


图3 出口气体摩尔分数随网格数量的变化

Fig.3 Variation of outlet gas mole fraction with the number of grids

格具有较大差异。因此本文使用计算较为准确且计算成本较低的8928个网格。

2.2 模型验证

描述本实验物理现象的流化床数值模型以及化学反应动力学模型均来自前人发表的文献,为了确保数值模型的准确性,将模拟结果与实验结果进行了对比验证,如图4所示。ER表示实际空气量与理论空气量的比值,S/B表示水蒸气与干生物质的比例。模拟结果与实验结果具有良好的一致性,模拟准确地预测了CH₄、CO、N₂的摩尔分数,误差基本在10%以下。然而模拟仍存在问题,如过高的预测了H₂的产生,这可能由于H₂含量较少导致误差相对较大;模拟也低估了CO₂的产生,最大误差为15.52%。较大的误差可归因于复杂的流化床气化反应系统以及动力学参数,总体而言,该误差满足模拟实验的要求,可以进行后续的模拟实验。

2.3 气化炉内气体分布以及温度分布

2.3.1 气体分布 图5为气体沿气化炉轴向变化的平均分布图。在生物质入口处,认为生物质瞬间热解,所以由热解脱挥发分产生的气体在入口处浓度最大,O₂在入口处就被CO、CH₄、H₂以及焦炭颗粒的燃烧完全消耗。CH₄的浓度主要受挥发分含量的影响,而脱挥发分主要发生在气化炉的下部,因此在生物质入口的高度以上,CH₄浓度的变化可以忽略不计。CO₂的浓度在气化剂入口处最大,在生物质入口处开始与焦炭发生气化反应,因此入口后CO₂的浓度显著下降,之后由于水煤气变换的正向反应,CO₂又逐渐升高。另一方面,水煤气变换反应在较低温度时有利于产生CO₂和H₂,因此在床层高度后H₂的浓度逐渐增加,H₂O和CO的浓度逐渐降低。

2.3.2 温度分布 图6和图7展示了流体温度随着炉膛高度的变化。从炉膛底部到床层高度这一段,

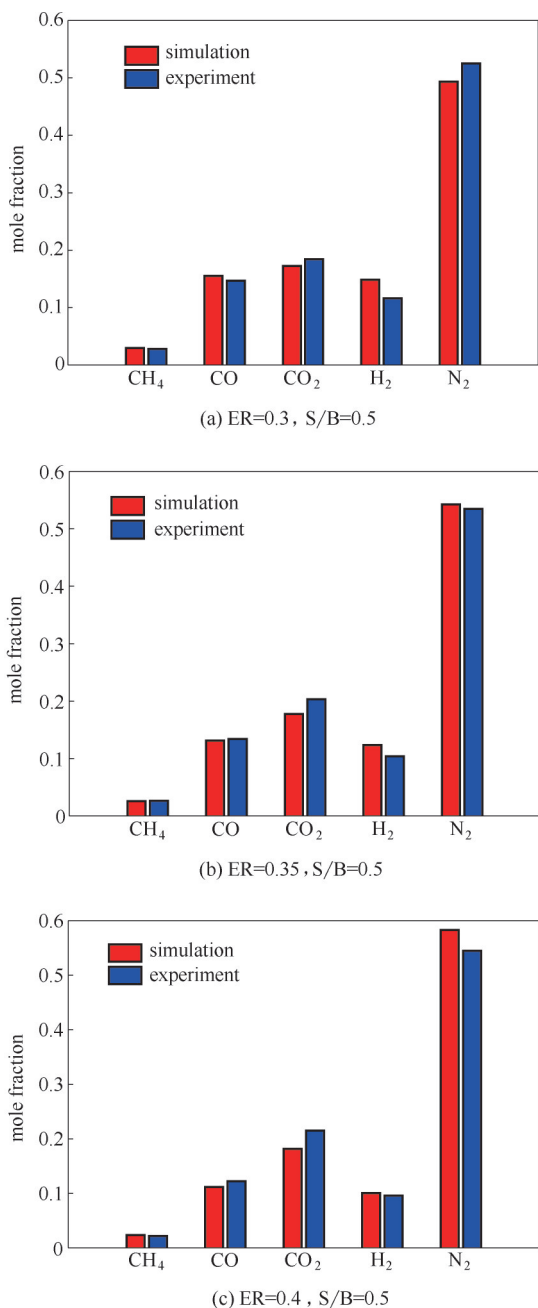


图4 实验数据与模拟数据比较

Fig.4 Comparison of experimental data and simulated data

由于焦炭和挥发分的剧烈燃烧放热导致温度不断上升,而在床层高度以上时,温度会发生急剧的下降,这是由于此时氧气已经被消耗完毕,气化反应占主导,吸收大量热量,使得炉温下降。然而在0.25m之后,焦炭颗粒被消耗完毕,二氧化碳气化、水蒸气气化速率降低,水煤气变换的正向放热反应会使温度有一个小幅度的回升,但总体趋势是温度随着炉膛的高度逐渐下降。

另一方面,可以发现气化炉内部温度相对比较

均匀,气化剂和生物质进入炉膛后能迅速加热升温。床层表面反应非常剧烈,在床层表面以下主要是发生燃烧反应放出热量为气化反应提供热量,床层表面以上主要发生气化反应吸收热量。图7中也可以观察到,在炉膛左侧出现了局部高温,这对气化炉的稳定性是不利的,这可能是由于生物质进入炉膛后,还未与床料充分混合便被挥发分气体和播料风夹带到了床层表面,而左侧位置由生物质热解产生的CO₂、H₂O和CH₄浓度较低,气化吸热反应较弱,从而出现了局部温度较高的情况,因此在气化炉设计中需要考虑生物质与床料的充分混合问题,可以将进料口设计一定的角度,使生物质斜向下进入气化炉。

2.4 生物质原料属性对气化特性的影响

2.4.1 生物质颗粒粒径对气化特性的影响

生物质颗粒的粒径是影响合成气质量和气化特性的重要参数之一。对进入气化炉的生物质颗粒进行破碎、研磨、干燥等预处理与能源的消耗成本有关。本文研究了生物质颗粒在气化温度为800℃,当量比ER=0.35, S/B=0.5的条件下对气化特性的影响。颗粒粒径对出口合成气摩尔分数的影响如图8所示。可以发现在颗粒粒径大于0.6 mm时,CO₂的摩尔分数增加,而CO、H₂和CH₄的摩尔分数随着颗粒粒径的增加而降低。这是因为随着生物质颗粒粒径增大,O₂向其扩散作用减弱,导致热解后的焦炭与氧气反应困难,使得脱挥发分产生的气体被氧气大量消耗,产生了更多的CO₂;另一方面,焦炭燃烧反应减弱后产生的热量减少,使CO₂和水蒸气的气化反应速率降低,导致气化特性变差。而对于颗粒粒径小于0.6 mm,出口的摩尔分数产生了相反的规律,这是因为在流化床中细小的颗粒容易被气体夹带出反应区域,导致焦炭燃烧和气化反应不完全,所以过小的颗粒不利于气化反应,将生物质颗粒研磨、破碎到较小颗粒也需要消耗更多能量。图9展示了CGE (cold-gas efficiency)、LHV (lower heating value)和碳转化率随着生物质颗粒粒径的变化规律,生物质颗粒直径从0.2 mm增加到0.6 mm时,CGE、LHV和碳转化率均随之增加;生物质颗粒进一步增加时,CGE、LHV和碳转化率均随之减小。因此,生物质颗粒粒径对气化性能的影响存在一个最优值,平均粒径为0.6 mm的生物质颗粒是最佳的。

2.4.2 生物质含水率的影响

图10为生物质含水

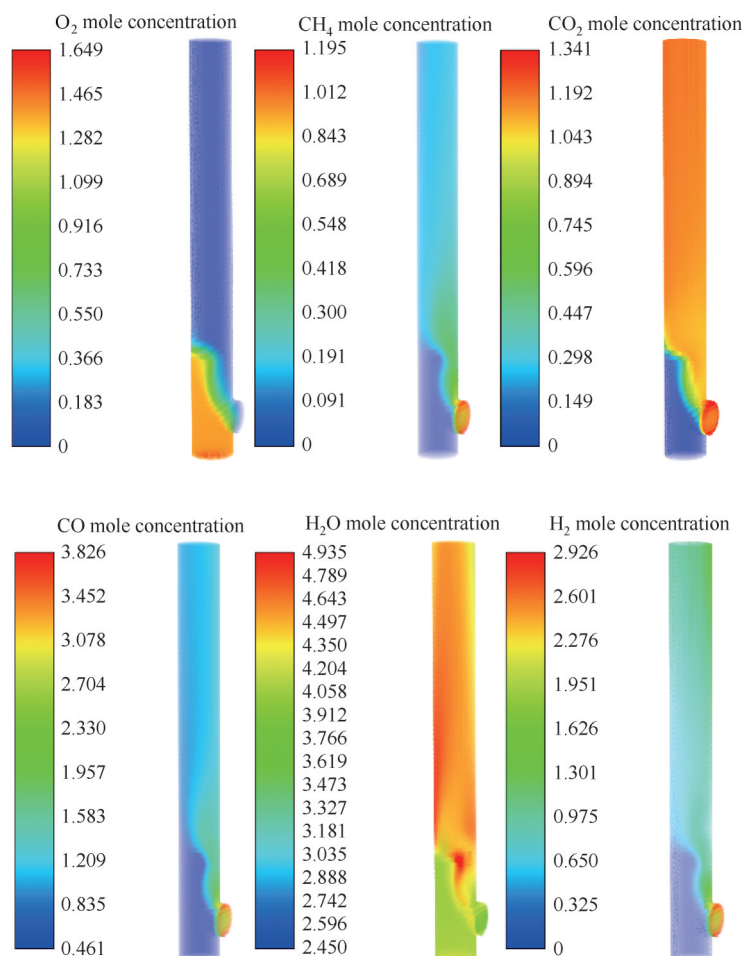


图5 气体沿气化炉轴向变化的平均分布 (ER=0.3, S/B=0.5)

Fig.5 The average distribution of gas changes along the axis of the gasifier (ER=0.3, S/B=0.5)

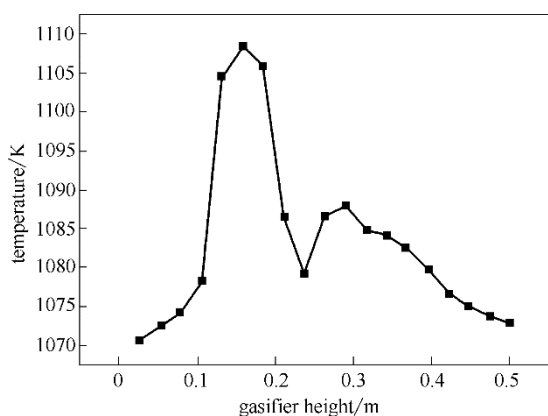


图6 流体温度沿轴向的变化 (T=25 s, ER=0.3, S/B=0.5)

Fig.6 Fluid temperature changes along the axis

率对气化炉出口合成气的摩尔分数影响,操作条件和上述相同。可以观察到含水率对可燃气体成分的影响较大,在空气和水蒸气的混合气化下, H₂、CO 以及 CH₄ 的摩尔分数均随着含水率从 5% 至 20% 而降低, CO₂ 的摩尔分数也随着含水率从 5% 到 20% 而增加,这主要是因为随着水分的增加,水蒸气分压

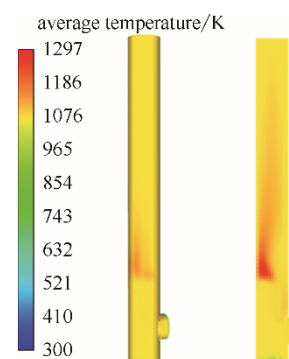


图7 流体温度沿轴向变化的云图

Fig.7 Contour of fluid temperature changing along the axis

增加导致水煤气变换反应向正向进行,即产生更多的 CO₂ 和 H₂。同时,过高含水率的生物质进入炉膛后会降低炉内温度,降低气化反应速率,因此含水率较高的生物质不利于 CO₂ 和 H₂O 的气化反应。所以,为了在水蒸气混合气化时获得质量较高的合成气,建议在将生物质送入气化炉之前进行干燥处理,尽可能保持较低水分。

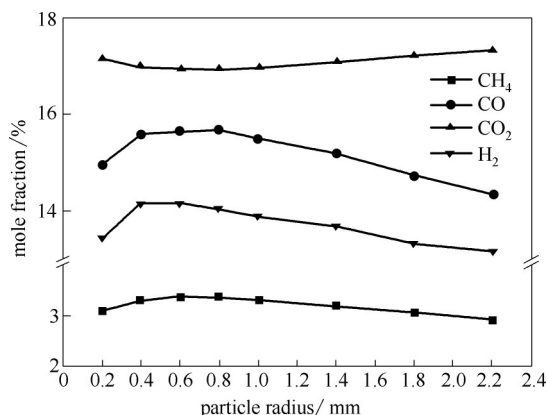


图8 颗粒粒径对合成气摩尔分数的影响

Fig.8 Effect of particle size on the mole fraction of syngas (800℃, ER=0.35, S/B=0.5)

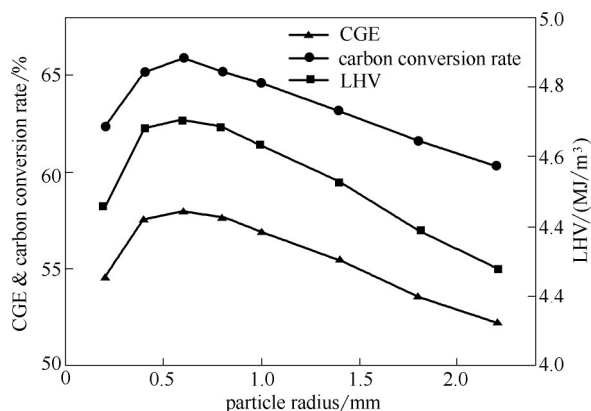


图9 颗粒粒径对CGE、LHV和碳转化率的影响

Fig.9 Effect of particle size on CGE, LHV and carbon conversion rate (800℃, ER=0.35, S/B=0.5)

2.4.3 生物质种类对气化特性的影响 生物质热解产生的挥发分组成对出口气体的组成影响较大,为了准确预测实验,本实验先通过管式炉对四种干燥后的生物质在800℃、氮气气氛下进行了热解脱挥发分实验,实验收集到的气体用GC-MS检测其成分,轻烃类产物都认为是CH₄,结果如表7所示。工业分析和元素分析结果如表8所示。本实验主要探究生物质不同的化学组成对气化特性的影响,不考虑生物质的物理结构差异,四种生物

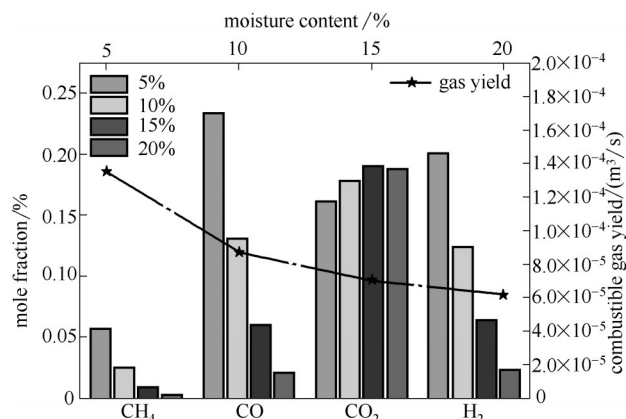


图10 生物质含水率对合成气摩尔分数的影响 (800℃, ER=0.35, S/B=0.5)

Fig.10 Effect of biomass moisture content on the mole fraction of syngas (800℃, ER=0.35, S/B=0.5)

表7 热解实验的气体组成

Table 7 Gas composition of pyrolysis experiment

原料	气体成分/(%) (体积)				
	H ₂	CO ₂	H ₂ O	CH ₄	CO
稻壳	1.72	23.27	8.04	13.58	53.39
锯末	1.71	25.86	11.60	12.24	48.59
树皮	1.80	30.80	9.31	11.48	46.61
玉米秸秆	1.86	28.27	11.29	12.58	45.99

质颗粒均视为直径呈0.25~0.35 mm正态分布的细小颗粒。

不同生物质在空气和水蒸气混合气化下出口处的可燃气体产量如图11所示,三种可燃气体中,锯末的产量最大,其中H₂产量为8.12 mol/kg,远高于其他三种生物质,紧接着是稻壳和树皮,产量最少的是秸秆。对于CH₄和CO,也呈现出了相似的规律,树皮和秸秆的产量均较低。

图12展示了不同生物质的气化效率、碳转化率和低位发热量的变化规律。可以发现,锯末的气化效率最高,为70.87%,低位热值也高于其他生物质,其次是稻壳,最低的是秸秆。值得注意的是,对碳转化率来说,锯末并不是最优的,稻壳的碳转化率

表8 四种生物质的工业分析和元素分析

Table 8 Industrial analysis and elemental analysis of the four biomass

原料	元素分析/(%)(mass)						工业分析/(%)(mass)				LHV/(MJ/kg)
	C _{ad}	H _{ad}	O _{ad}	N _{ad}	S _{ad}	M _{ad}	FC _{ad}	V _{ad}	A _{ad}	M _{ad}	
稻壳	40.11	5.28	35.59	0.32	0.07	6.2	15.65	65.7	12.45	6.2	15.55
锯末	45.82	5.63	38.69	0.32	0.12	8.91	16	74.59	0.5	8.91	16.91
树皮	38.39	5.03	31.41	0.53	0.11	11.6	14.64	60.83	12.93	11.6	14.5
玉米秸秆	30.64	4.07	29.9	0.87	0.1	8.6	16.71	48.87	25.82	8.6	11.12

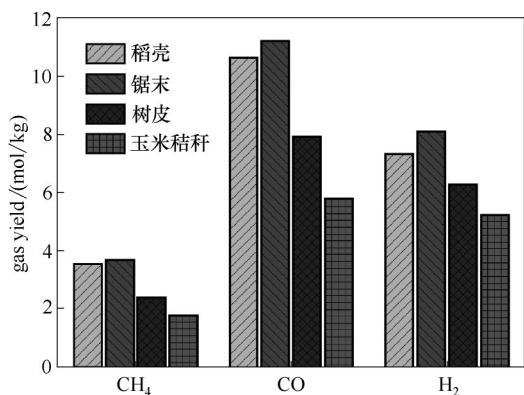


图11 不同生物质气化的可燃气体产量

Fig.11 Combustible gas production from different biomass gasification (800°C, ER=0.35, S/B=0.5)

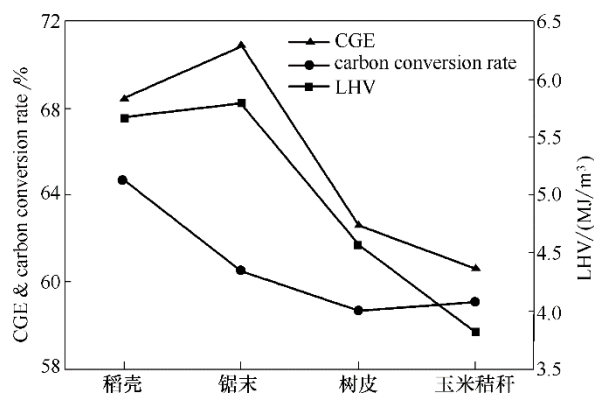


图12 不同生物质气化的CGE、LHV和碳转化率

Fig.12 CGE, LHV and carbon conversion rate of different biomass gasification (800°C, ER=0.35, S/B=0.5)

最高,为64.71%;锯末的碳转化率其次,为60.50%;树皮和秸秆的碳转化率较低。可见,使用锯末进行气化,效率高、可燃气体产量大、气体热值高,这主要得益于锯末高挥发分含量、高碳元素占比以及极低的灰含量;树皮和秸秆的气化特性较差,主要因为其灰分含量和水分含量较大,进入气化炉的可反应物较少,同时内在水分也降低了气化反应的温度。

2.5 操作条件对气化特性的影响

2.5.1 气化温度的影响 从图13中可以看出,温度升高,合成气中可燃气体H₂和CO的产量增加,而CO₂和CH₄的产量降低。由于CO₂气化反应、水蒸气气化以及甲烷和水蒸气的反应都是吸热反应,因此温度升高有助于可燃气体H₂和CO的生成。水煤气变换反应在高温下有利于产生CO和H₂O^[26],消耗CO₂和H₂,而H₂的生成量大于消耗量,因此CO₂的产量降低,CO、H₂产量升高。H₂/CO的比例也随温度逐渐升高,说明温度升高后,H₂的产量增加量大于

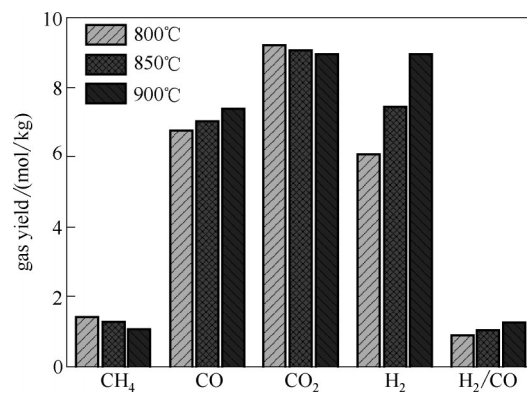


图13 气化温度对气体产量的影响(ER=0.35,S/B=0.5)

Fig.13 Effect of gasification temperature on gas production (ER=0.35, S/B=0.5)

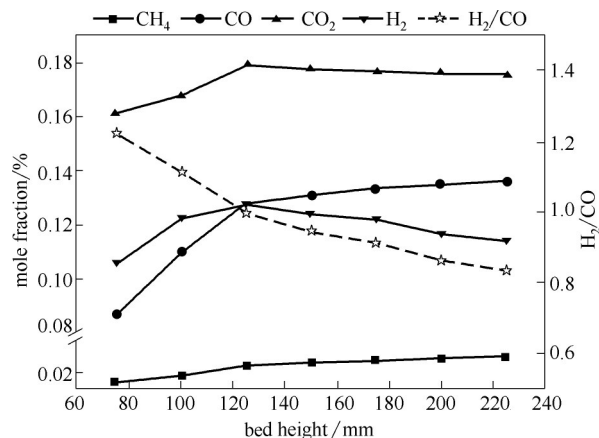


图14 初始床层高度对出口气体摩尔分数的影响

(ER=0.35, S/B=0.5)

Fig.14 Effect of initial bed height on outlet gas mole fraction (ER=0.35, S/B=0.5)

CO的产量增加。气化效率也从800°C的56.85%增加到了900°C的61.75%。因此,提高温度会增加合成气的质量,有助于提高气化效果,同时可以改变H₂/CO的比例。

2.5.2 初始床高的影响 初始床层高度对气固流动影响较大,尤其是对于颗粒体积分数和压力,这些影响进而对化学反应产生作用,使得生物质颗粒停留、反应时间发生变化,影响出口气体的组成。本研究中,75~225 mm的床层高度被用来研究对出口气体组成的影响。如图14所示,初始床层低于130 mm时,生物质颗粒被气流夹带严重,气化效果较差;而大于130 mm时,CO和CH₄随着初始床层高度的增加而增加,CO₂和H₂随之减小。初始床层高度使得密相区的高度发生变化,高度增加后,生物质热解后的焦炭颗粒停留时间更长,且不容易被夹带出炉膛,同时反应区域温度更高,高温有利于水

煤气逆反应生成CO消耗CO₂和H₂^[26]。同时,初始床层高度的改变也使得H₂/CO的比例发生变化。工业应用中,对合成气含量中的H₂/CO有要求,因此可以通过改变床层高度的方法改变H₂和CO相对组成。

3 结 论

本文采用CPFD方法对鼓泡流化床生物质气化反应进行了几何建模和模拟研究数值模拟,模拟数据和实验数据呈现出良好的一致性,同时探究了炉内的气体分布和温度分布,研究了生物质属性和操作条件对空气-水蒸气混合气化特性的影响,主要结论归纳如下:

(1)对于原料属性,在生物质颗粒大于0.6 mm时,CO₂的摩尔分数随着颗粒粒径的增加而增加,而CO、H₂和CH₄的摩尔分数降低;LHV、CGE以及碳转化率也随之减小,气化性能变差;当颗粒粒径小于0.6 mm,规律恰好相反。因此,生物质颗粒粒径对气化性能的影响存在一个最优值,平均粒径为0.6 mm的生物质颗粒是最佳的。高含水率会降低气化温度,不利于气化反应,因此需将生物质进行干燥预处理,尽可能保持较低水分。使用锯末气化效率高、可燃气体产量大、气体热值高,而树皮和玉米秸秆的气化特性较差。稻壳的气化指标均仅次于锯末,而碳转化率高于锯末。

(2)对于操作条件,气化温度升高,可燃气体的摩尔分数增大,CO₂的摩尔分数下降,气化效率也从800℃的56.85%增加到了900℃的61.75%。初始床层达到一定高度后继续增加,生物质热解后的焦炭颗粒停留时间变长,高温反应区增高,有利于水煤气逆反应生成CO、H₂O,同时使得H₂/CO的比例随之降低,因此可以通过改变床层高度的方法改变H₂/CO的比例。

符 号 说 明

A ——颗粒加速度
 C_v ——比定容热容
 D_g ——气相湍流扩散系数
 d_p ——颗粒直径
 d_s ——颗粒直径, m
 F_s ——颗粒间的摩擦应力
 g ——重力加速度, m/s²
 h_g ——混合物焓值
 $\delta \dot{m}_{g,i}$ ——均相反应产生的气体组分*i*的质量变化

$\delta \dot{m}_s$ ——单位体积内的气体质量变化, kg/m³
 $\delta \dot{m}_{s,i}$ ——非均相反应产生的气体组分*i*的质量传递
 P ——平均压力, Pa
 Q_{ij} ——颗粒间的导热
 Q_{radi} ——颗粒与壁面间的辐射换热
 Q_{reac} ——反应热
 Q_{sg} ——颗粒与气体间的对流传热
 q ——气体相与固体相之间的能量传递
 $\dot{q}_D$ ——由于组分扩散引起的能量变化
 Re ——Reynolds数
 S_h ——气体相与固体相之间的能量传递
 u_g, u_s ——分别为气、固相速度, m/s
 $Y_{g,i}$ ——气体组分的质量分数
 α_g, α_s ——分别为气、固相体积分数
 ρ_g, ρ_s ——分别为气、固相密度, kg/m³
 τ_g ——气相应力张量
 τ_s ——颗粒碰撞应力
 φ ——黏性耗散

参考文献

- [1] Cheng Y, Thow Z, Wang C H. Biomass gasification with CO₂ in a fluidized bed[J]. Powder Technology, 2016, **296**: 87–101.
- [2] 虞君武, 何榕, 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, (6): 471–477.
 Yu J W, He R, Zhang Y G. Numerical simulation of biomass gasification in bubbling fluidized bed[J]. Journal of Combustion Science and Technology, 2014, (6): 471–477.
- [3] 苏德仁, 刘华财, 周肇秋, 等. 生物质流化床氧气-水蒸气气化实验研究[J]. 燃料化学学报, 2012, **40**(3): 309–314.
 Su D R, Liu H C, Zhou Z Q, et al. Experimental study on oxygen–water vaporization of biomass fluidized bed[J]. Journal of Fuel Chemistry, 2012, **40**(3): 309–314.
- [4] Gerber S, Behrendt F, Oevermann M. An Eulerian modeling approach of wood gasification in a bubbling fluidized bed reactor using char as bed material[J]. Fuel, 2010, **89**(10): 2903–2917.
- [5] Yu X, Blanco P H, Makkawi Y, et al. CFD and experimental studies on a circulating fluidised bed reactor for biomass gasification[J]. Chemical Engineering and Processing–Process Intensification, 2018(130): 284–295.
- [6] Eri Q, Peng J, Zhao X. CFD simulation of biomass steam gasification in a fluidized bed based on a multi-composition multi-step kinetic model[J]. Applied Thermal Engineering, 2018, **129**: 1358–1368.
- [7] Kraft S, Kimbauer F, Hofbauer H. CPFD simulations of an industrial-sized dual fluidized bed steam gasification system of biomass with 8 MW fuel input[J]. Applied Energy, 2017, **190**: 408–420.
- [8] Radmanesh R, Chaouki J, Guy C. Biomass gasification in a bubbling fluidized bed reactor: experiments and modeling[J]. AIChE Journal, 2006, **52**(12): 4258–4272.
- [9] Shayan E, Zare V, Mirzaei I. Hydrogen production from biomass gasification; a theoretical comparison of using different

- gasification agents[J]. Energy Conversion and Management, 2018, **159**: 30–41.
- [10] Fremaux S, Beheshti S M, Ghassemi H, et al. An experimental study on hydrogen-rich gas production *via* steam gasification of biomass in a research-scale fluidized bed[J]. Energy Conversion and Management, 2015, **91**: 427–432.
- [11] Pauls J H, Mahinpey N, Mostafavi E. Simulation of air-steam gasification of woody biomass in a bubbling fluidized bed using Aspen Plus: a comprehensive model including pyrolysis, hydrodynamics and tar production[J]. Biomass and Bioenergy, 2016, **95**: 157–166.
- [12] 车德勇, 李少华, 韩宁宁, 等. 生物质流化床空气-水蒸气气化模拟[J]. 中国电机工程学报, 2012, **32**(35): 101–106.
Che D Y, Li S H, Han N N, et al. Simulation of air-water vaporization of biomass fluidized bed[J]. Proceedings of the CSEE, 2012, **32**(35): 101–106.
- [13] Zhao L, Lu Y. Hydrogen production by biomass gasification in a supercritical water fluidized bed reactor: a CFD-DEM study[J]. The Journal of Supercritical Fluids, 2018, **131**: 26–36.
- [14] Cardoso J, Silva V, Eusébio D, et al. Comparative 2D and 3D analysis on the hydrodynamics behaviour during biomass gasification in a pilot-scale fluidized bed reactor[J]. Renewable Energy, 2019, **131**: 713–729.
- [15] Di Nardo A, Calchetti G, Stendardo S. Modeling and simulation of an oxygen-blown bubbling fluidized bed gasifier using the computational particle-fluid dynamics (CPFD) approach[J]. Journal of Applied Fluid Mechanics, 2018, **11**(4): 825–834.
- [16] Xie J, Zhong W, Jin B, et al. Eulerian – Lagrangian method for three-dimensional simulation of fluidized bed coal gasification[J]. Advanced Powder Technology, 2013, **24**(1): 382–392.
- [17] Loha C, Chattopadhyay H, Chatterjee P K. Energy generation from fluidized bed gasification of rice husk[J]. Journal of Renewable & Sustainable Energy, 2013, **5**(4): 1367–1377.
- [18] Loha C, Chattopadhyay H, Chatterjee P K. Three dimensional kinetic modeling of fluidized bed biomass gasification[J]. Chemical Engineering Science, 2014, **109**(16): 53–64.
- [19] Snider D M, Clark S M, Rourke P J. Eulerian – Lagrangian method for three-dimensional thermal reacting flow with application to coal gasifiers[J]. Chemical Engineering Science, 2011, **66**(6): 1285–1295.
- [20] Smagorinsky J S. General circulation experiments with the primitive equations (I): The basic experiment[J]. Monthly Weather Review, 1963, (91): 99–164.
- [21] Wang S, Luo K, Hu C, et al. Impact of operating parameters on biomass gasification in a fluidized bed reactor: an Eulerian–Lagrangian approach[J]. Powder Technology, 2018, **333**: 304–316.
- [22] Gungor A. Two-dimensional biomass combustion modeling of CFB [J]. Fuel, 2008, **87**(8): 1453–1468.
- [23] Thapa R K, Pfeifer C, Halvorsen B M. Modeling of reaction kinetics in bubbling fluidized bed biomass gasification reactor[J]. Energy and Environment, 2014, **5**(1): 35–44.
- [24] de Souza-Santos M L. Comprehensive modelling and simulation of fluidized bed boilers and gasifiers[J]. Fuel, 1989, **68**(12): 1507–1521.
- [25] Gómez-barea A, Leckner B. Modeling of biomass gasification in fluidized bed[J]. Progress in Energy & Combustion Science, 2010, **36**(4): 444–509.
- [26] Gonzalo C. Kinetics of CO₂ gasification for coals of different ranks under oxy-combustion conditions[J]. Combustion & Flame, 2013, **160**(2): 411–416.
- [27] Chen C, Werther J, Heinrich S, et al. CPFD simulation of circulating fluidized bed risers[J]. Powder Technology, 2013, **235**: 238–247.
- [28] Abbasi A, Ege P E, de Lasa H I. CPFD simulation of a fast fluidized bed steam coal gasifier feeding section[J]. Chemical Engineering Journal, 2011, **174**(1): 341–350.
- [29] Ku X, Li T, Løvås T. Influence of drag force correlations on periodic fluidization behavior in Eulerian–Lagrangian simulation of a bubbling fluidized bed[J]. Chemical Engineering Science, 2013, **95**: 94–106.