

生物油燃烧与污染物排放特性的数值模拟

张栋, 陆强, 朱锡锋*

中国科学技术大学安徽省生物质洁净能源重点实验室, 合肥 230026

* 联系人, E-mail: xfzhu@ustc.edu.cn

2010-01-05 收稿, 2010-08-24 接受

国家重点基础研究发展计划(20007CB210203)、国家科技支撑计划(2007BAD34B02)、国家自然科学基金(50930006)和中国科学院知识创新工程方向性项目(KGCX2-YW-330)资助

摘要 应用 CFD(computational fluid dynamics)软件 FLUENT 对实验室自砌小型窑炉装置内生物油的燃烧进行三维数值模拟. 获得了炉膛流场、温度场、组分分布、火焰形状及污染物排放的详细信息, 揭示了炉膛内部流动、燃烧及传热传质过程的特点. 对不同过量空气系数下生物油的燃烧进行数值模拟, 结果表明, 随着过量空气系数的增加, 炉膛内最高温度减小, 燃烧区域增大, 尾气中 CO 的浓度减小, 但 NO 的浓度增加. 模拟结果与试验数据吻合良好, 验证了模型的可靠性, 为燃烧工况的优化设计和污染物的控制提供了一定的依据.

关键词

窑炉
生物油
燃烧
数值模拟
过量空气系数

生物质能源作为传统能源最有希望的替代品之一, 正在受到越来越多的关注. 生物质热解油(以下简称生物油)是指在中温、缺氧的条件下, 将生物质颗粒迅速加热裂解, 再迅速冷凝后得到的一种棕黑色液体^[1~3]. 与传统石油基燃料相比, 生物油具有热值低、黏度高、含氧量和含水量高、点火困难、酸性和腐蚀性等特点^[4~7]. 这些缺点导致生物油很难应用到成熟的热力设备中, 通过改造现有的设备及优化燃烧工况才可以使用, 不少学者作了大量工作. Chiamonti 等人^[8,9]将生物油及其乳化液应用于柴油机中, 发现生物油很难压燃, 柴油机喷射系统出现严重的磨损和积炭现象, 运行不稳定. Czernik 等人^[10]研究显示, 生物油对锅炉的适应性好, 只需对燃料供应系统进行必要的改造就可稳定运行, 烟气排放量低于重油. 刘承远等人^[11]在自砌小型窑炉中进行生物油的直接燃烧试验得到, 通过预热炉膛、使用辅助火源和调整雾化参数等多种途径解决点火问题, 生物油可以稳定燃烧, 污染物的排放符合国家标准.

近年来, 随着计算机硬件的发展和传热传质模型的完善, 数值模拟已成为研究燃料燃烧及污染物

生成的复杂过程的有效手段^[12,13], 使生物油燃烧的数值模拟成为可能. 本文应用 CFD(computational fluid dynamics)软件 FLUENT 对自砌窑炉内生物油的燃烧进行了三维数值模拟, 研究炉膛内部流动、燃烧及传热传质过程的特点, 得到了炉膛内温度场、流场、组分分布及污染物生成过程的详细信息, 并考察了过量空气系数对燃烧的影响, 为燃烧工况的优化设计和污染物控制提供了理论依据.

1 物理模型

为了研究生物油燃烧性能, 实验室砌建了小型窑炉燃烧装置. 窑炉长 4 m、宽 0.6 m、高 1 m, 结构如图 1 所示, 整个炉膛使用黏土砖和保温砖砌成, 保温砖之间填充玻璃纤维以达到更好的保温效果, 通过铂铑热电偶测量炉膛内温度分布. 实验所用喷嘴是工业用 RK30 型燃油喷嘴, 此喷嘴可以在较低油压下对生物油进行较好的雾化. 喷嘴外径为 0.08 m, 喷口直径为 0.03 m, 置于正方形的炉膛入口中, 其截面边长为 0.1 m. 生物油预先放入密封的储油罐中, 然后在压力近乎恒定的压缩空气的挤压下进入喷嘴,

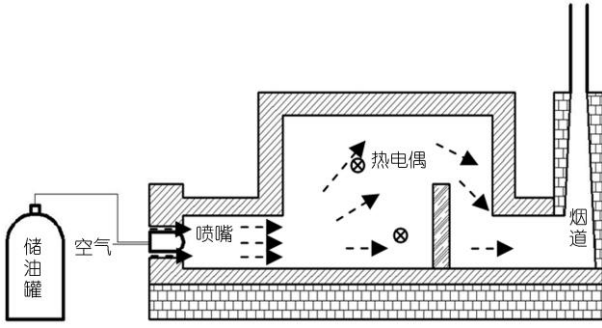


图1 窑炉燃烧装置的结构示意图

被雾化空气破碎后以小液滴的形式喷入炉膛，喷嘴中的雾化空气由空气压缩机提供。除雾化空气外，燃烧所需的空气由烟道的抽吸作用从喷嘴与入口墙壁之间的空隙吸入。烟道为圆形钢管，内径为 0.3 m，顶端距地面约 8 m，在距地面 6 m 处设置调节系统，通过调节烟道截面的大小控制烟道的抽吸力，从而改变燃烧时的过量空气系数。生物油燃烧后尾气从炉膛进入烟道后排入大气中，在烟道上设有监测口，使用多功能烟气分析仪分析尾气中的氧含量和污染物的浓度。窑炉的结构决定了生物油在其中的停留时间较长，燃烧较为充分。

燃烧试验所用的生物油是以稻壳为原料制成的。热重实验初步分析可知，生物油的点火和燃烧性能较差^[14]。利用现代分析手段对生物油的元素组成、物理性质等进行分析可得，生物油含氧量超过 50%，含水量高，热值低，黏度大，pH 为 3.2，具体结果见表 1。根据生物油元素组成建立燃料模型，由表 1 测量结果对其燃料性质进行设定。

2 数值模拟

2.1 数学模型

连续性方程、动量方程及能量方程在直角坐标下的统一形式如(1)式所示：

$$\begin{aligned} \frac{\partial(\rho\phi_u)}{\partial x} + \frac{\partial(\rho\phi_v)}{\partial y} + \frac{\partial(\rho\phi_w)}{\partial z} &= \frac{\partial}{\partial x} \left(\Gamma_\phi \frac{\partial \phi}{\partial x} \right) \\ &+ \frac{\partial}{\partial y} \left(\Gamma_\phi \frac{\partial \phi}{\partial y} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(\Gamma_\phi \frac{\partial \phi}{\partial z} \right) + S_\phi + S_{d\phi}, \end{aligned} \quad (1)$$

式中， Γ_ϕ 为有效扩散系数， S_ϕ 是由气相反应引起的源相， $S_{d\phi}$ 是由液体颗粒引起的源相。

当式(1)中 $\phi=1$ ， $\Gamma_\phi=0$ 时为连续性方程，而 $\phi=\mu, v, w, h$ 时则分别对应于 x, y, z 方向的动量方程和能量方程。

组分输运方程：

$$\frac{\partial(\rho\omega_i)}{\partial t} + \Delta \cdot (\rho\mu\omega_i) = \Delta \cdot (\mu\Delta\omega_i) + S_{\omega_i}, \quad (2)$$

式(2)中， ω_i 表示第 i 种组分的质量分数。

使用 Realizable $k-\varepsilon$ 模型模拟气相湍流有较高的精度，在模型中关于 k, ε 的传输方程如下：

紊动能 k 方程：

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t}(\rho k) + \frac{\partial}{\partial x_j}(\rho k u_j) \\ = \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\mu + \frac{\mu_t}{\sigma_k} \frac{\partial k}{\partial x_j} \right) + G_k + G_b - \rho\varepsilon - \gamma_M, \end{aligned} \quad (3)$$

耗散率 ε 方程：

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t}(\rho\varepsilon) + \frac{\partial}{\partial x_j}(\rho\varepsilon u_j) &= \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\left(\mu + \frac{\mu_t}{\sigma_\varepsilon} \right) \frac{\partial \varepsilon}{\partial x_j} \right] \\ &+ \rho C_1 S_\varepsilon - \rho C_2 \frac{\varepsilon^2}{k + \sqrt{v\varepsilon}} + C_{1\varepsilon} \frac{\varepsilon}{k} C_{3\varepsilon} G_b, \end{aligned} \quad (4)$$

其中， $C_{1\varepsilon}, C_2, \sigma_k, \sigma_\varepsilon$ 为传输耗散常数； G_k 为因速度梯度产生的湍流动能源项； G_b 为因浮力产生的湍流动能源项； γ_M 为在可压缩湍流中波动扩张引起的耗散项； η 为有效因子， $\eta = S \frac{k}{\varepsilon}$ ； ρ 由可压缩气体状态方程控制； μ_t 表示湍流黏性。

生物油燃烧的模拟包括气相连续流场的建模和气相与生物油液滴非连续相作用的建模。在数值模拟中，流动和燃烧由质量、动量、能量、化学组分的守恒方程及 Realizable $k-\varepsilon$ 湍流方程描述，并与燃烧反应模型和液相颗粒轨道模型联立求解。生物油是一种混合物，针对其燃料特性，使用混合分数/概率密度函数(PDF)模型模拟生物油燃烧过程中发生的化学反应，根据燃烧的主要中间产物设置的平衡系统由 17 种成分组成。此外，使用 DPM 颗粒模型模拟生物油雾化颗粒分布情况，粒径分布符合 Rosin-Rammler

表1 稻壳生物油的元素组成和理化特性

元素组成(%)					密度	含水量	表面张力	黏度	高位热值	pH
C	H	O	N	S	/kg·m ⁻³ (293 K)	(%)	/N·m ⁻¹ (293 K)	cSt(313 K)	/MJ·kg ⁻¹	
37.48	8.28	53.45	0.59	0.00036	1130	28.3	0.035	10.2	15.7	3.2

公式, 计算中考虑了液滴内部传热和液滴气化对传热传质的影响; 用 P1 模型模拟辐射传热; 使用燃料型、热力型和快速型 NO_x 模型模拟 NO 的生成.

2.2 计算区域及网格划分

窑炉为非轴对称结构, 利用 FLUENT 自带的前处理 CAD 软件 Gambit 建立窑炉的全尺度三维模型. 模型建立过程中: 几何尺寸以窑炉实际尺寸为准; 忽略保温砖的厚度, 即以窑炉的内壁面为模型边界; 由于炉膛尺寸大, 形状不规则, 因此在计算中对喷雾系统和烟道进行了简化, 将喷嘴简化为助燃空气和雾化空气入口两个部分, 它们之间的喷嘴壁面设置为绝热壁面. 对整个炉体划分四面体适体网格, 同时对喷嘴出口、烟气出口以及挡火墙的周边等速度梯度较大的区域进行局部加密, 提高关键区域的计算精度, 计算区域和网格划分见图 2.

2.3 边界条件设定

表 2 表示过量空气系数为 1.15 时窑炉的运行参数. 生物油储油罐中油压保持 0.3 MPa, 经过初步检测, 在室温下距喷嘴出口 0.2 m 处, 纯生物油的雾化颗粒平均粒径约为 $100\text{ }\mu\text{m}^{[15]}$, 雾化锥角约 30° , 以此来设定燃油流量、喷雾锥角、喷油压力和颗粒离散分布情况. 雾化空气由空气压缩机提供, 通过气体流量计控制流量, 助燃空气从入口抽吸进入炉膛, 通过烟囱的开度控制过量空气系数, 空气入口设置为速度

边界条件. 虽然预热可以减小生物油的黏度, 提高雾化质量, 但会造成结焦堵塞油路, 所以生物油和雾化空气都不进行预热. 炉膛内壁面设定为绝热无滑移边界, 出口使用压力边界条件, 压力设为 -100 Pa , 以保证炉膛出口有一定的抽力, 模拟烟囱的效果.

3 模拟结果与讨论

采用 SIMPLE 算法求解压力-速度耦合问题, 动量、能量、组分、湍动能和湍流耗散率均采用二阶迎风差分格式. 计算得到燃烧炉内温度场、速度场及混合气体的组成, 以残差图的变化来观察收敛情况.

3.1 燃烧温度场及流场

生物油较难点燃, 需要使用外加火源点火, 初始阶段的火焰并不稳定, 需持续的火源维持燃烧. 当炉膛经过一段时间预热后, 内壁面和烟气温度增大, 对进入炉膛的新鲜生物油的辐射增强, 使油滴升温速度加快, 雾化质量提高, 更快地析出挥发分, 此时生物油可以实现稳定燃烧. 根据表 2 所示的运行参数设定模拟边界条件, 分析了生物油稳定燃烧时整个炉膛内温度场及流场的特点.

图 3 表示生物油稳定燃烧时, 炉膛 $Z=0$ 截面的温度等值线. 由图可见, 在燃烧器入口处, 高速燃油液滴中的一部分小液滴首先经历蒸发过程, 继而与助燃空气接触发生燃烧反应. 燃烧释放的热量又使周围的液滴蒸发, 并使周围气体受热膨胀. 未完全燃烧的燃油蒸汽和挥发份与空气形成混合气体, 在炉膛内进一步发生燃烧反应. 由于生物油喷入速度快、雾化液滴粒径大, 所以燃烧火焰较长. 高温燃烧区域沿 X 轴变宽, 温度沿轴线先升高后降低. 火焰上方加热室温度均匀, 平均温度约 850 K 左右.

图 4 为窑炉 $Z=0$ 截面的速度分布图, 高速喷入燃烧器的油滴离开喷头后, 在燃烧器内形成一个锥形的射流. 空气和烟气组成的混合气体沿着炉膛轴线传播, 速度逐渐降低, 同时卷吸炉膛中的烟气, 其射流效应导致炉膛内形成一个很大的壁面回流, 在空

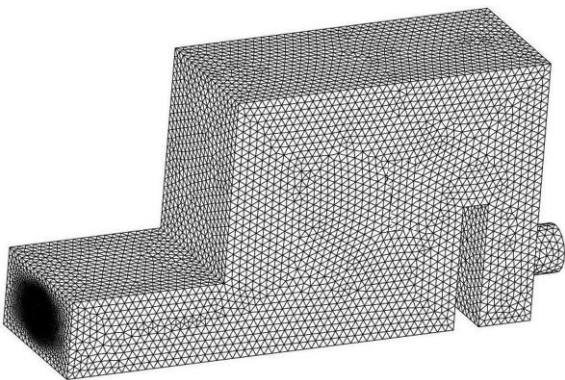


图 2 计算区域及网格划分

表 2 运行参数

生物油		雾化空气		助燃空气	
质量流量/ $\text{kg}\cdot\text{h}^{-1}$	温度/K	质量流量/ $\text{kg}\cdot\text{h}^{-1}$	温度/K	质量流量/ $\text{kg}\cdot\text{h}^{-1}$	温度/K
50	293	39.2	293	240.65	293

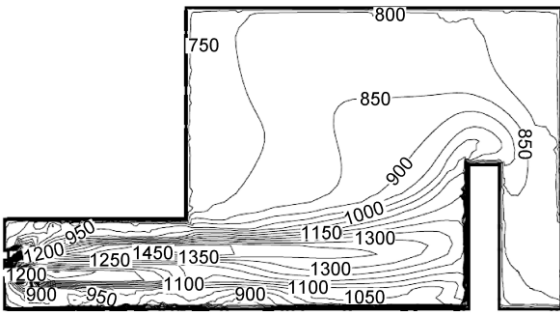


图 3 $Z=0$ 截面温度分布图

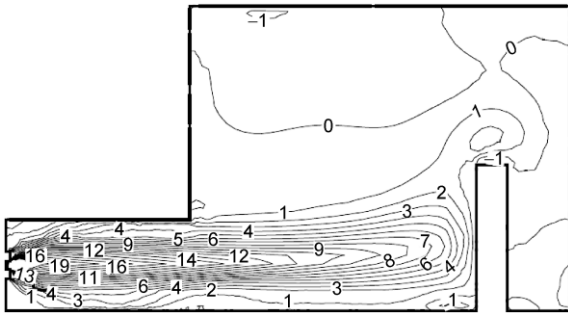


图 4 $Z=0$ 截面的轴向速度分布图

气入口处最为强烈。回流有利于生物油和空气的混合,有利于油滴的雾化和蒸发,也有利于火焰的稳定。当高温混合气体流到挡火墙前,部分烟气绕过墙体直接进入烟道中,另一部分在火焰上方的加热室内形成一个大范围的回流。烟气在加热室内流动缓慢,温度均匀,适合工业产品的加热,验证了窑炉结构的合理性。数值模拟可以得到试验中难以测量的数据,为炉膛结构的优化设计提供了依据。

3.2 过量空气系数对温度的影响

过量空气系数(λ)是影响燃烧特性的重要因素,过大或过小都会影响火焰的稳定性,甚至造成不能点燃或吹熄。模拟中保持生物油和雾化空气流量不变,改变助燃空气流量,以研究过量空气系数对炉膛内的温度分布及污染物生成的影响。

图 5 表示过量空气系数不同时,喷口和挡火墙之间的火焰中心线上温度的分布。由图 5 可得,不同工况下的轴线温度分布规律相同。炉膛温度迅速升高,然后沿轴线先增大后减小。由于喷头周围回流区的存在,温度在该区域出现图中所示波谷,即回流区中心由于大量相对温度较低的空气的进入,使其温度比前后火焰温度要低。而在回流区下游,温度达到峰

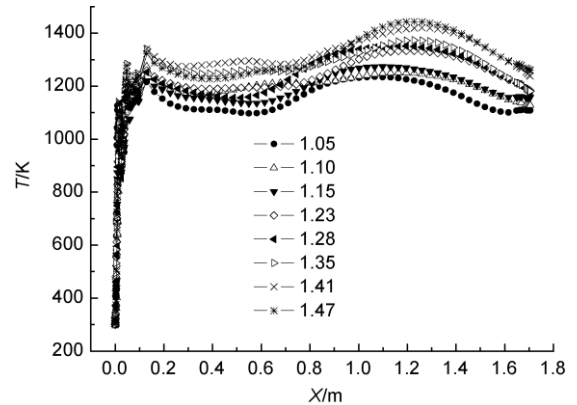


图 5 火焰中心轴温度的分布

值后,随着燃料的燃尽及热量的释放,温度呈单调下降趋势。随着过量空气系数的增加,混合气体流速加快,燃烧区域向下游扩展,温度峰出现位置后移,且温度值有所增加。

为了验证模型的可靠性,进行燃烧校核试验。试验时改变烟囱的开度以控制过量空气系数,通过监测尾气中的氧含量来确定对应的模拟工况。图 6 显示温度的模拟结果与实际测量值随过量空气系数的变化。从中可见,随着过量空气系数的增加,测温点 1 的温度增加,而测温点 2 的温度随着过量空气系数先增加后减小, $\lambda=1.28$ 时测温点 2 的温度最高,达到 900 K。温度的模拟结果与实际测量值的变化趋势相同,数值较为吻合,误差在 10%之内。过量空气系数的增加延长了火焰长度,增大了火焰体积,使火焰在较大区域释放化学反应热,因此处于火焰下游区域的测温点 1 的温度升高,但是炉膛最高温度和平均温度均降低。测温点 2 在加热室内,其温度主要受回流烟气温度及火焰辐射的影响。当 $\lambda < 1.28$ 时,过量空

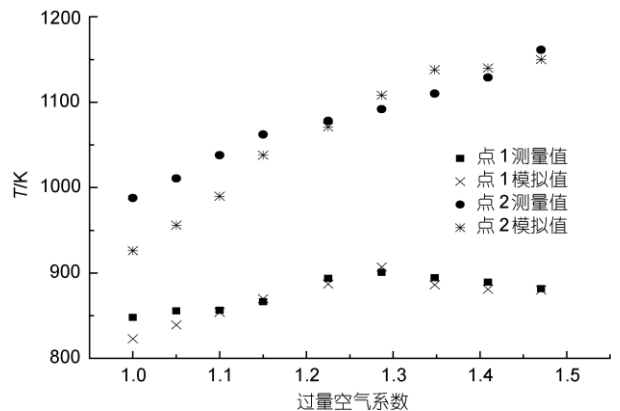


图 6 温度计算结果与测量值的对比

气系数的增加能显著增加通过回流进入加热室的高温烟气量,因此测温点2的温度逐渐增大.过量空气系数继续增加,回流进入加热室的烟气量增加幅度减小,同时回流烟气温度和火焰温度下降,致使加热室通过混合和辐射得到的热量减少,所以测温点2的温度达到峰值后逐渐降低.

3.3 过量空气系数对污染物生成的影响

图7和8分别显示不同过量空气系数时,CO和NO摩尔分数沿火焰中心轴的变化曲线,据此可以分析污染物的生成过程.不同工况下CO摩尔分数的变化趋势相同,沿轴线先快速增大到峰值,然后缓慢减少.生物油进入炉膛受热后析出挥发分,挥发分的裂解及不完全燃烧都会生成一氧化碳,在 $X=0.3\text{ m}$ 处CO的摩尔分数最大,约占混合气体总量的12%.此后由于燃料逐渐耗尽,CO的生成量减少,并与氧气进一步燃烧生成 CO_2 ,所以CO摩尔分数沿轴线逐渐减小.随着过量空气系数的增加,CO受到了一定程度的稀释,同时混合气体中氧含量的增加促进了CO的燃烧反应,这两方面的原因使曲线右端CO的摩尔分数值减小.NO的摩尔分数沿轴线的分布受流场及温度场影响较大,首先随着炉膛温度的上升,生成大量燃料型和快速型 NO_x ,NO摩尔分数迅速增加;在 $X=0.6\text{ m}$ 处开始减少,这是由于回流卷吸周围空气使得NO被稀释,同时NO被CO还原成氮气;最后NO的摩尔分数沿轴向增加,即气体混合均匀后,含氮化合物和氮气在高温区域中与氧气发生反应生成更多的NO.过量空气系数的增加虽然在一定程度上稀释了NO,但会促进燃料型NO和热力型NO的生成,所以曲线右端NO的摩尔分数随之增加.

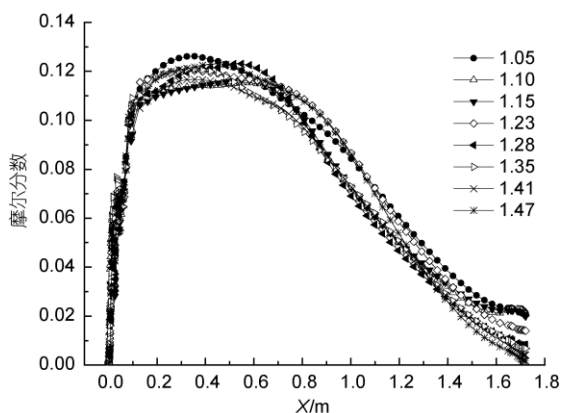


图7 CO摩尔分数沿火焰中心轴的变化

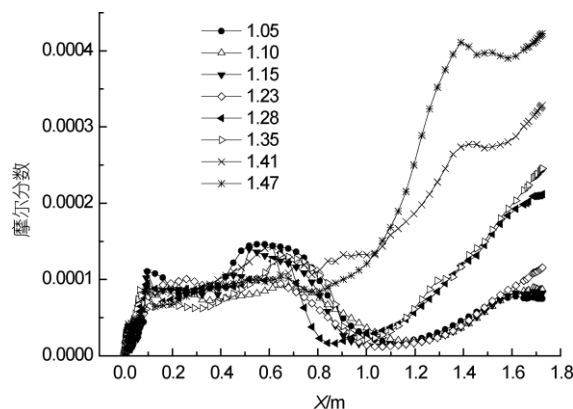


图8 NO摩尔分数沿火焰中心轴的变化

图9表示尾气中CO,NO浓度计算结果和实际测量值随空气过量系数的变化曲线.模拟结果表明,随着过量空气系数的增加,尾气中CO的浓度减小,NO的浓度增加,由于空气的稀释作用,浓度的变化幅度都逐渐减小.过量空气系数在1.25左右时,尾气中CO,NO的浓度可以分别控制在 150 和 $350\text{ mg}\cdot\text{m}^{-3}$ 以下,符合国家规定的烟气排放标准.由图9可以看出,CO和NO浓度的模拟值和测量值随过量空气系数的变化规律一致,说明所选计算模型和边界条件较合理,可以模拟实际情况.但在某些条件下CO浓度的模拟值和测量值差别较大,这可能是由于生物油燃烧的化学反应过程较为复杂,目前尚没有详细的反应机理,而本文使用的混合分数/概率密度函数模型是一种简化的反应模型,与实际反应存在差异,其精度有待进一步提高.同时,PDF燃烧模型对炉膛温度的模拟也有一定的偏差,而温度对NO的生成有很大影响,因此反应模型也可能是造成尾气中NO浓度的模拟值和测量值差别的主要原因.

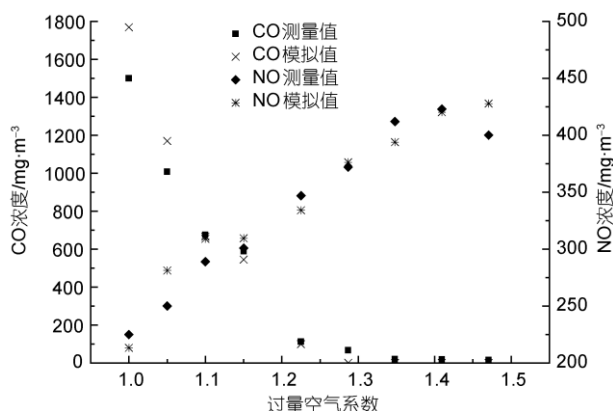


图9 尾气中CO,NO的浓度计算结果与测量值的对比

4 结论

以自砌小型窑炉装置为物理模型,应用 CFD 软件 FLUENT 对生物油在窑炉内的燃烧过程进行了三维数值模拟。模拟结果可得,窑炉设计合理可靠,加热室温度均匀稳定,生物油燃烧性能良好,燃烧时最高温度达到 1650 K 以上。随着过量空气系数的增加,

火焰体积增加,炉膛最高温度减小,加热室温度先增加后减小,尾气中 CO 的浓度明显减小,但是会生成更多的 NO。温度和尾气中污染物浓度的计算结果与实际测量值吻合良好,验证了模型的可靠性。最佳过量空气系数为 1.25,此时窑炉加热室的温度较高,尾气中 CO 和 NO 的浓度值都能控制在较低的水平。

参考文献

- 1 朱锡锋,郑冀鲁,陆强,等. 生物质热解液化装置研制与试验研究. 中国工程科学, 2006, 8: 89—93
- 2 Wang X H, Chen H P, Luo K, et al. The influence of microwave drying on biomass pyrolysis. *Energ Fuel*, 2008, 22: 67—74
- 3 Lu Q, Zhu X F, Li W Z, et al. On-line catalytic upgrading of biomass fast pyrolysis products. *Chinese Sci Bull*, 2009, 54: 1941—1948
- 4 Oasmaa A, Czernik S. Fuel oil quality of biomass pyrolysis oils—State of the art for the end user. *Energ Fuel*, 1999, 13: 914—921
- 5 朱锡锋,郑冀鲁,郭庆祥,等. 生物质热解油的性质、精制与利用. 中国工程科学, 2005, 7: 83—88
- 6 Zhang S P, Yan Y J, Li T C, et al. Upgrading of liquid fuel from the pyrolysis of biomass. *Bioresour Technol*, 2005, 96: 545—550
- 7 Lu Q, Zhang J, Zhu X F. Corrosion properties of bio-oil and its emulsions with diesel. *Chinese Sci Bull*, 2008, 53: 3726—3734
- 8 Chiamonti D, Oasmaa A, Solantausta Y. Power generation using fast pyrolysis oils. *Renew Sust Enery Rev*, 2007, 11: 1056—1086
- 9 Chiamonti D, Bonini M, Fratini E, et al. Development of emulsions from biomass pyrolysis liquid and diesel and their use in engines - Part 1: emulsion production. *Biomass Bioenerg*, 2003, 25: 85—99
- 10 Czernik S, Bridgwater A V. Overview of applications of biomass fast pyrolysis oil. *Energ Fuel*, 2004, 18: 590—598
- 11 刘承运,陆强,孙书生,等. 稻壳生物油的燃烧及污染物排放特性研究. 燃料化学学报, 2008, 36: 577—582
- 12 Saario A, Rebola A, Coelho P J, et al. Heavy fuel oil combustion in a cylindrical laboratory furnace: Measurements and modeling. *Fuel*, 2005, 84: 359—369
- 13 Papadakis A, Bridgwater A V, Gu S. CFD modelling of the fast pyrolysis of biomass in fluidised bed reactors, Part A: Eulerian computation of momentum transport in bubbling fluidised beds. *Chem Eng Sci*, 2008, 63: 4218—4227
- 14 李理,阴秀丽,吴创之,等. 生物油热解及燃烧特性分析. 太阳能学报, 2008, 29: 733—737
- 15 Garcia-Perez M, Challa A, Pakdel H, et al. Characterization of bio-oils in chemical families. *Biomass Bioenerg*, 2007, 31: 222—242

Numerical simulation of bio-oil combustion and pollutant emissions

ZHANG Dong, LU Qiang & ZHU XiFeng

Key Laboratory of Biomass Clean Energy of Anhui Province, University of Science and Technology of China, Hefei 230026, China

The commercial CFD-code FLUENT was used to simulate the bio-oil combustion in a lab-scale kiln. Three-dimensional numerical simulation was performed to obtain detailed information of the temperature and velocity fields, component distribution, flame shape and pollutant emissions, so as to reveal the characteristics of the flow, combustion, heat and mass transfer process in the kiln. The effect of excess air ratio on bio-oil combustion was also simulated. The results indicated that with the increasing of excess air ratio, the maximum combustion temperature and the CO concentration in the outlet were decreased, while the formation of NO_x was increased. The simulation results agreed well with the experimental results, which confirmed the reliability of the model and would offer information for the combustion system optimization and pollutant control.

kiln, bio-oil, combustion, numerical simulation, excess air ratio

doi: 10.1360/972009-1380