

# 将生物燃料变为低成本 可再生能源

美国国家可再生能源实验室的研究人员正使用多物理场仿真来更好地理解  
和优化植物性生物燃料的转化过程。

作者: JENNIFER SEGUI

生物燃料有望在众多应用领域中代替化石燃料, 例如, 它可以作为一种新能源来为建筑物供暖、发电, 以及为交通行业提供动力。

基于植物性材料制造的生物燃料有诸多优势, 我们通常把这类材料叫做生物质。这种燃料具有可再生、燃烧清洁, 所排放的二氧化碳不会超过原始植物来源的隔离量的特点。但即使在这类燃料最常见的交通运输这一应用中, 它的使用也仍然相当有限。根据美国能源信息管理局的报告, 截止 2014 年, 只有 2% 的零售加油站提供乙醇基燃料 E85。

生物燃料制造工艺本身就为大规模应用造成了一个重大经济壁垒。美国国家可再生能源实验室 (NREL) 正在计算热解协会 (Computational Pyrolysis Consortium) 的支持下开展研究, 希望能更好地理解生物燃料转化背后的物理过程, 研究人员专门为此开发了一个包含至今为止最精确生物质颗粒几何的计算模型; 然后使用该模型来针对生物燃料大规模生产的要求改进反应器设计和操作。

这项工作最终将为生物燃料带来更大的成本效益, 以及对那些将在几十年内消耗殆尽的传统不可再生能源的竞争优势。



图 1. 准备热解时, 如左图所示的木质生物质被粉碎, 并可能经过其他化学处理。要开发一个完整的热解模型 (右图), 需考虑多个物理过程, 包括传热、传质、化学反应和相变。照片中的长颈烧瓶会收集在试运行反应器中经热解产生的浓缩生物油蒸汽。图片提供者: Warren Gretz (NREL 05756, 左) 及 Phil Shepherd (NREL 03677, 右)。



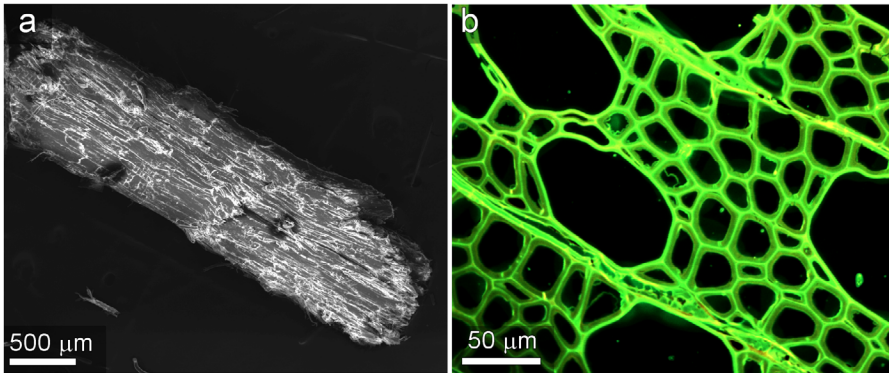


图 2. 左: 扫描电子显微图像确定了硬木生物质颗粒的形状和结构。右: 共聚焦激光扫描显微图显示了粒子截面的微结构。

“由于 COMSOL 中已经提供了几何工具、物理场、网格剖分和求解器，所以我们可以投入更多时间使生物质模型的几何十分准确。”

— PETER CIESIELSKI, NREL 研究科学家

## → 利用植物制造燃料

图 1 显示了类似热解的热化学过程，通过暴露在高温下实现分解，并将生物质颗粒转化为可支持日常生活用途的液体生物燃料。NREL 研究项目的目标之一是改进常用于木质生物质快速热解的试运行热化学转化法，下方侧边栏对此方法进行了更加详细的介绍。

Peter Ciesielski 是 NREL 的一位研究科学家，他正和同事们使用多物理场仿真来深入了解利用热解实现生物质转化背后的基本过程，研究从其中的传热和传质开始。

通过生物质颗粒的高效传热与传质，可以促进转化触

媒的穿透及增加所需产品的逸出，从而能尽量减少焦炭的生成，并加速有利的反应。Ciesielski 的工作考察了生物质颗粒的大小、形状及内部微结构的影响，这些都取决于木材种类和热解前采取的粉碎工艺。

## → 精确的生物物质模型

在设计用来理解和优化生物质转化过程的计算研究中，通常会采用生物质颗粒的简化几何，而忽略内部微结构。

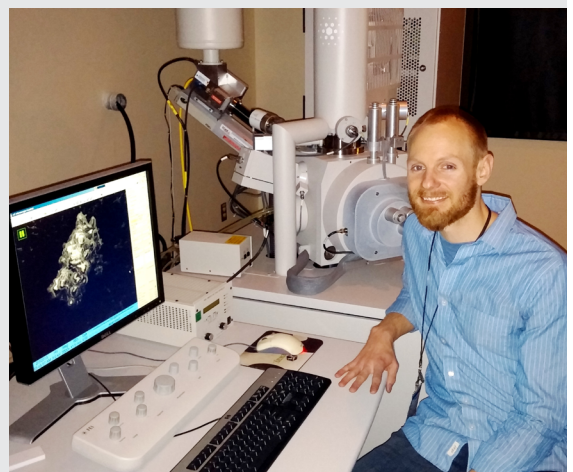
Ciesielski 的研究目标是通过在 COMSOL Multiphysics® 软件中开发一个考虑内部微结构的模型，来更加深入地理解生

## 计算热解协会

Ciesielski 的工作获得了计算热解协会的支持，并由美国能源部赞助，这是由 NREL、橡树岭国家实验室 (Oakridge National Laboratory, ORNL)，以及美国国家标准技术研究所 (National Institute of Standards and Technology, NIST) 联合进行的一个研究项目。这项合作计划中汇聚了来自计算模拟、生物质转化、反应器设计，以及材料特征等领域的大量专家，他们旨在优化利用热解进行的生物燃料生产。

要理解热解的含义，您不妨先想一下没有火焰的火。热解是一种热化学转化方法，通过将生物质暴露于高温无氧环境而实现分解。没有氧气，就没有燃烧或火焰。热解的结果是把生物质转换为焦炭，生成一种叫做生物油的液体产物，并会在化学反应中生成一种气体产物。对生物油进行精炼即可得到生物燃料。

NREL 的快速热解研究将该工艺继续向前推进了一步，研究人员使用极高的传热速率来分解生物质，内部温度会在 1 秒内升高至 500 °C。



Peter Ciesielski 是 NREL 的一名研究科学家，照片中他正坐在扫描电子显微镜旁，他在《Energy & Fuels》杂志上所发表文章内的木质生物质图像正是通过此显微镜获取。

物质中的传热和传质。“由于 COMSOL 中已经提供了几何工具、物理场、网格剖分和求解器，所以我们可以投入更多时间使生物物质模型的几何十分精确。” Ciesielski 解释道。

为了能够生成用于 COMSOL 仿真的三维生物物质模型，他们综合了多种成像方法来表征每类生物物质的外部形态、尺寸分布，以及内部微结构。图 2 显示了针对本研究获取的图像示例。

根据图像确定了生物物质颗粒的外部 and 内部尺寸，据此创建了一个实体几何，并将其作为 COMSOL 中一系列布尔几何运算的输入项。如图 3 所示，完整几何包括两个域。

### → 模拟热解：传热与传质

要通过快速热解实现生物物质的分解，首先需要在几秒内将无氧反应釜加热到高温（约 500 °C）。应用这些条件后，使用 COMSOL 的共轭传热接口来模拟如图 3a 所示的外部流体域之间的传热，其中包括氮气和生物物质颗粒。流体域中的传热以对流为主，但在接触面及生物物质颗粒内部的传热仅为热传导。

仿真在高性能计算 (HPC) 集群中运行，其中包括一或两个计算节点，每个节点均包括 24 个 Intel® Xeon® Ivy Bridge 处理器，以及 64 GB 内存。图 3b 显示了共轭传热瞬态仿真中硬木生物物质颗粒在 0.5 秒后的温度分布。我们可以针对给定的颗粒尺寸、形状以及微结构确定整个颗粒（尤其是颗粒中心）达到最优分解温度所需的时间量。

他们在另一个单独的仿真中评估了硫酸的扩散，这是一种在将生物物质转化为生物燃料前对其进行预处理的化学物质。使用稀物质传递接口对微结构和固体颗粒几何中的传质进行了瞬态仿真，本例中周围的流体为水。

传热和传质的研究结果显示，在评估和优化生物燃料的转化过程时，我们可能无法通过固体模型，特别是球形模型，来实现足够的精度，因此使用微结构是较为合理的做法。

### → 大型反应器设计的输入项

虽然当前研究的重点是生物物质中的传热和传质，但要充分理解和优化利用快速热解制造生物燃料这项技术，其中的快速相变和化学反应也很关键。在接下来的研究中，Ciesielski 会继续在他的仿真中加入这些因素，COMSOL 的这项功能也是他选择该软件的一个重要原因。

而且，团队对计算模型的最终计划远不止于此。他们通过仿真获得了有关生物物质中传递的基本知识，并针对一系列工艺参数和生物物质原料确定了低阶模型的有效关联式。该关联式可用于优化进行大规模生物燃料生产的大型反应器的设计和操作，提升工艺效率，并使成本更低。❖

### 参考文献

<sup>1</sup> P. N. Ciesielski, et. al., Energy Fuels, 2015, 29(1), pp 242-254.

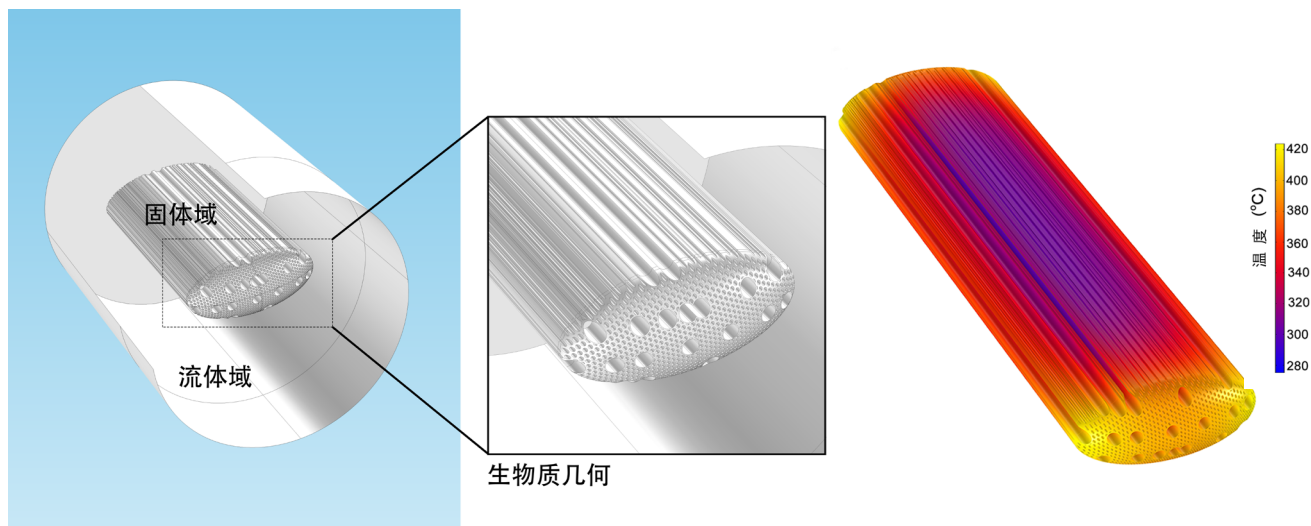


图 3. 左：COMSOL® 软件模型几何，包含围绕硬木生物物质颗粒的流体域。右：共轭传热瞬态仿真得到的温度分布。