

Математическое моделирование термического разложения древесных частиц в продуваемом слое

И. Г. Донской

Институт систем энергетики им. Л.А. Мелентьева СО РАН, Иркутск, Россия

Контактный e-mail: donskoy.chem@mail.ru

Рассмотрена задача термического разложения совокупности последовательно расположенных древесных частиц с учетом внешнего теплообмена с газовым потоком и внутренних физико-химических процессов (теплопроводность, диффузия, фильтрация, сушка и химическая реакция). Математическая модель строится из субмоделей одиночных частиц, сопряженных по потокам теплоты и массы. Результаты численных расчетов позволяют исследовать динамическое поведение частиц в условиях плотного слоя, что представляет интерес при проектировании малых энергетических установок на биотопливе.

Ключевые слова: биомасса, твердое топливо, одиночная частица, плотный слой, пиролиз, процессы переноса.

Библиографическая ссылка: Донской И.Г. Математическое моделирование термического разложения древесных частиц в продуваемом слое // Вычислительные технологии. 2018. Т. 23, № 6. С. 14–24. DOI: 10.25743/ICT.2018.23.6.003.

Введение

Термическое поведение древесных частиц представляет интерес с точки зрения пожарной безопасности [1], энергетического использования [2] и производства химических продуктов [3]. Важное значение при нагреве и горении древесины имеет пиролиз — разложение органической массы без участия внешнего окислителя, сопровождающееся образованием летучих и тяжелых смолистых продуктов. Одной из особенностей пиролиза древесины в условиях плотного слоя является неоднородность реагирования частиц: термическое разложение начинается с поверхности и по мере прогрева распространяется в глубь частицы. Существующие математические модели пиролиза частиц по уровню детализации химической подзадачи можно разделить на следующие группы: химический процесс рассматривается как фазовый переход [4]; химический процесс рассматривается как брутто-реакция с эффективными значениями кинетических коэффициентов [5–7]; химический процесс рассматривается детально, с выделением индивидуальных компонентов в продуктах разложения [8, 9]. Обычно предполагается, что частица симметрична и может быть описана в одномерной постановке, хотя такое упрощение не всегда адекватно, в том числе из-за свойственной древесным материалам анизотропии [10, 11]. В ряде работ анализируются возможности сведения задач с пиролизом частиц к симметричным одномерным задачам [12] и даже точечным задачам

с явно выделенными фронтами физико-химических превращений [13]. Это упрощение интересно с точки зрения использования таких субмоделей в CFD-кодах [14].

При рассмотрении пиролиза совокупности частиц (например, при исследовании работы пиролизеров) массив частиц обычно усредняют и представляют в виде однородной фазы с характерными параметрами, которые определяют ее термическое сопротивление [15]. Такие подходы, как Discrete Elements Method (DEM) [16, 17], напротив, дают очень детальное описание процессов теплообмена как внутри отдельных частиц, так и между ними и внешними потоками, однако требуют больших вычислительных ресурсов. Промежуточное место занимают подходы, в которых для каждой расчетной ячейки выделяется усредненная частица, динамика поведения которой определяет динамику поведения всей ячейки, к которой она принадлежит [8, 18]. Подобный подход применен в настоящей работе. Модель используется для исследования динамики пиролиза совокупности частиц в плотном слое, в отличие от предыдущих работ явным образом выделяется лучистый перенос теплоты между поверхностями частиц в соседних областях. С помощью этой модели исследовано влияние интенсивности потока греющего газа на эффективность прогрева частиц в разных точках слоя.

1. Уравнения для описания процессов переноса и химической кинетики

Предполагаем, что частица имеет симметричную форму, сферическую или цилиндрическую. В частице протекают процессы теплопроводности и диффузии, испарения влаги и термического разложения органической массы. Температура частицы неоднородна вдоль пространственной координаты — радиуса частицы r , который изменяется от 0 до $d_0/2 = R$, но температуры твердой и газовой фаз в каждой точке равны между собой.

Уравнение теплового баланса записывается следующим образом:

$$c_p \rho \frac{\partial T}{\partial t} = \frac{1}{r^n} \frac{\partial}{\partial r} \left[r^n \left(\lambda \frac{\partial T}{\partial r} - \Pi u c_p \rho^g T \right) \right] + Q_{dry} w_{dry} + Q_{pyr} w_{pyr}. \quad (1)$$

Изменение температуры происходит за счет теплопроводности, переноса теплоты потоком газа в порах частиц, а также физико-химических превращений — сушки и пиролиза. В уравнении (1) T — температура, К; c_p — удельная теплоемкость, Дж/кг/К; ρ — плотность, кг/м³; λ — коэффициент теплопроводности, Вт/м/К; Π — пористость; u — скорость движения газа, м/с; Q — тепловой эффект, Дж/кг; w — скорость физико-химического процесса, кг/м³/с. Индекс *dry* относится к сушке, индекс *pyr* — к пиролизу. Показатель симметрии n равен нулю для пластины, равен 1 для цилиндра и 2 для сферы, последние два случая соответствуют экспериментальным данным, на которых проводилась верификация модели. Приведем уравнение баланса массы компонентов газовой фазы:

$$\frac{\partial C_j}{\partial t} = \frac{1}{r^n} \frac{\partial}{\partial r} \left[r^n \left(D_j \frac{\partial C_j}{\partial r} - u C_j \right) \right] + w_j. \quad (2)$$

Изменение концентрации j -го компонента (C_j , моль/м³) происходит за счет диффузии (D_j — коэффициент диффузии, м²/с), конвективного потока и выделения компонентов из топлива при сушке и пиролизе. Концентрации компонентов связаны с общим

давлением P и плотностью ρ^g через уравнение состояния идеального газа

$$P = R_g T \sum_j^{N_g} C_j, \quad \rho^g = \sum_j^{N_g} M_j^r C_j, \quad (3)$$

где $R_g = 8.314$ Дж/моль/К — универсальная газовая постоянная; M_j^r — молекулярная масса j -го компонента. Конвективный поток газа в порах связан с неоднородностью давления уравнением Дарси

$$u = -\frac{k_D}{\mu} \frac{\partial P}{\partial r}, \quad (4)$$

где k_D — коэффициент проницаемости, м²/с; μ — динамическая вязкость газа, Па·с.

Граничные условия для температуры и концентраций компонентов на поверхности включают конвективный теплообмен и лучистый перенос:

$$-\lambda \frac{\partial T}{\partial r} \Big|_{r=R} = \frac{\text{Nu} \lambda_g}{d_0} (T - T_{env}) + \sum_p a_p \varepsilon_p \sigma (T^4 - T_p^4), \quad (5)$$

$$-D_j \frac{\partial C_j}{\partial r} \Big|_{r=R} = \frac{\text{Nu}_D D_j}{d_0} (C_j - C_{j,env}). \quad (6)$$

Здесь λ_g — теплопроводность греющего газа; Nu — теплообменное число Нуссельта; Nu_D — массообменное число Нуссельта; d_0 — диаметр частицы, м. В последнем слагаемом (5) ε — степень черноты (эффективность поглощения излучения поверхностью, меняется от 0.9 для древесины до 0.99 для древесного угля), а суммирование происходит по всем излучающим поверхностям, которые взаимодействуют с частицей, причем вклад каждой поверхности оценивается весовым коэффициентом a_p .

Давление на поверхности частицы равно внешнему давлению обтекающего частицу газа:

$$P \Big|_{r=R} = P_{end}. \quad (7)$$

Кинетика сушки приближенно описывается эффективными аррениусовыми коэффициентами k_{dry} и E_{dry} [7]. Скорость испарения зависит также от разности давления паров воды и его равновесного значения $P_{\text{H}_2\text{O}}^{eq}$:

$$w_{dry} = k_{dry} \exp\left(\frac{-E_{dry}}{R_g T}\right) (P_{\text{H}_2\text{O}}^{eq} - P_{\text{H}_2\text{O}}). \quad (8)$$

Давление насыщенных паров также зависит от температуры:

$$\ln(P_{\text{H}_2\text{O}}^{eq}) = A - B/T. \quad (9)$$

Скорость пиролиза также описывается с помощью эффективных кинетических коэффициентов для одностадийной брутто-реакции k_{pyr} и E_{pyr} , которые обычно определяют экспериментально [19]:

$$w_{pyr} = k_{pyr} \exp\left(\frac{-E_{pyr}}{R_g T}\right) (\rho^s - \rho^{char}), \quad (10)$$

Численные значения коэффициентов для березовой древесины

Величина	Размерность	Значение	Величина	Размерность	Значение
R_g	Дж/моль/ К	8.314	k_{pyr}	c^{-1}	$1 \cdot 10^7$
A	—	13.125	E_{pyr}	Дж/моль	$8 \cdot 10^4$
B	K^{-1}	-4931.3	k_{dry}	c^{-1}	$1 \cdot 10^9$
ρ_0^s	кг/м ³	950	E_{dry}	Дж/моль	$7 \cdot 10^4$
ρ^{char}	кг/м ³	91	Π^{wood}	—	0.1
Q_{dry}	Дж/кг	$-2.7 \cdot 10^6$	Π^{char}	—	0.4
$Q_{pyr,1}$	Дж/кг	$-2 \cdot 10^5$	k_D^{wood}	м ² /с	$2 \cdot 10^{-11}$
$Q_{pyr,2}$	Дж/кг	$5 \cdot 10^4$	k_D^{char}	м ² /с	$1.6 \cdot 10^{-6}$

где ρ^s — плотность топлива, кг/м³; ρ^{char} — плотность огарка (твердого остатка после окончания выхода летучих продуктов пиролиза), кг/м³. Степень превращения древесины можно выразить через переменную X :

$$X = \frac{\rho^s - \rho^{char}}{\rho_0^s - \rho^{char}}. \tag{11}$$

Тогда теплофизические свойства древесины (теплоемкость, коэффициент теплопроводности) можно рассчитать по аддитивным формулам из работы [10]. Таким же образом определяются локальная пористость и коэффициент проницаемости:

$$\Pi = X\Pi^{wood} + (1 - X)\Pi^{char}, \tag{12}$$

$$k_D = Xk_D^{wood} + (1 - X)k_D^{char}. \tag{13}$$

Теплота фазового перехода влаги постоянна, теплота пиролиза линейно зависит от степени превращения:

$$Q_{pyr} = XQ_{pyr,1} + (1 - X)Q_{pyr,2}. \tag{14}$$

Индексы *wood* и *char* относятся к крайним состояниям (исходная древесина при $X = 1$ и полностью обуглившаяся древесина при $X = 0$). Здесь $Q_{pyr,1} < 0$, $Q_{pyr,2} > 0$, т. е. процесс термического разложения протекает с поглощением теплоты при низких степенях превращения и с выделением теплоты — при высоких, что соответствует экспериментальным измерениям [20]. Значения входящих в уравнения (1)–(14) коэффициентов приведены в таблице (для березовой древесины).

2. Алгоритм численного решения

Переменными задачи являются температура, давление и состав газа, влажность и степень превращения топлива. Предполагается, что в начальный момент эти величины равномерно распределены по радиусу. Динамика их изменения определяется уравнениями (1) и (2) с граничными условиями (5)–(7). Для численного решения производится дискретизация этих уравнений на равномерной сетке:

$$T_i^k = T_i^{k-1} + \frac{\Delta\tau\lambda_{i-1,i}S_{i-1,i}}{\Delta V_i c_p,i \rho_i} (T_{i-1}^k - T_i^k) + \frac{\Delta\tau\lambda_{i,i+1}S_{i,i+1}}{\Delta V_i c_p,i \rho_i} (T_{i+1}^k - T_i^k) +$$

$$\begin{aligned}
& +\delta_{i-1,i}\Pi_{i-1}\frac{\Delta\tau\rho_{i-1}^g S_{i-1,i}}{c_{p,i}\rho_i\Delta V_i}u_{i-1,i}T_{i-1}^k - \\
& -(1-\delta_{i-1,i})\Pi_i\frac{\Delta\tau\rho_i^g S_{i-1,i}}{c_{p,i}\rho_i\Delta V_i}u_{i-1,i}T_i^k - \delta_{i,i+1}\Pi_i\frac{\Delta\tau\rho_i^g S_{i,i+1}}{c_{p,i}\rho_i\Delta V_i}u_{i,i+1}T_i^k + \\
& +(1-\delta_{i,i+1})\Pi_{i+1}\frac{\Delta\tau\rho_i^g S_{i,i+1}}{c_{p,i}\rho_i\Delta V_i}u_{i,i+1}T_{i+1}^k + \Delta\tau(Q_{dry}w_{dry,i}^{k-1} + Q_{pyr}w_{pyr,i}^{k-1}), \tag{15}
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
(N_j)_i^k &= (N_j)_i^{k-1} + \frac{\Delta\tau D_j S_{i-1,i}}{\Delta r} \left(\frac{(N_j)_{i-1}^k}{\Pi_{i-1}\Delta V_{i-1}} - \frac{(N_j)_i^k}{\Pi_i\Delta V_i} \right) + \\
& + \frac{\Delta\tau D_j S_{i,i+1}}{\Delta r} \left(\frac{(N_j)_{i+1}^k}{\Pi_{i+1}\Delta V_{i+1}} - \frac{(N_j)_i^k}{\Pi_i\Delta V_i} \right) + \delta_{i-1,i} \frac{\Delta\tau S_{i-1,i}}{\Pi_{i-1}\Delta V_{i-1}} u_{i-1,i} (N_j)_{i-1}^k - \\
& -(1-\delta_{i-1,i}) \frac{\Delta\tau S_{i-1,i}}{\Pi_i\Delta V_i} u_{i-1,i} (N_j)_i^k - \delta_{i,i+1} \frac{\Delta\tau S_{i,i+1}}{\Pi_i\Delta V_i} u_{i,i+1} (N_j)_i^k + \\
& +(1-\delta_{i,i+1}) \frac{\Delta\tau S_{i,i+1}}{\Pi_{i+1}\Delta V_{i+1}} u_{i,i+1} (N_j)_{i+1}^k + \Delta\tau (w_j)_i^{k-1}. \tag{16}
\end{aligned}$$

Здесь N_j — количество j -го газа, моль. Геометрические параметры определяются элементарными формулами: $S_{i,i+1} = 4\pi r_i^2$ и $\Delta V_i = \frac{4\pi}{3}(r_i^3 - r_{i-1}^3)$ для сферической частицы, $S_{i,i+1} = 2\pi r_i$ и $\Delta V_i = \pi(r_i^2 - r_{i-1}^2)$ для цилиндрической частицы. Скорость движения газа через границу, разделяющую две соседние ячейки, определяется выражением

$$u_{i,i+1} = \left(\alpha \frac{k_{D,i}}{\mu_i} + (1-\alpha) \frac{k_{D,i+1}}{\mu_{i+1}} \right) \frac{P_i - P_{i+1}}{\Delta r},$$

где весовой коэффициент $\alpha = 0.5$. Переменная $\delta_{i,i+1} = \max[0, \text{sgn}(u_{i,i+1})]$ в уравнениях (15) и (16) определяет направление потока [21].

Схема (15), (16) консервативна и имеет первый порядок аппроксимации по временному шагу и второй порядок по пространственному шагу. Полученная система разностных уравнений решается неявным методом, при этом используется расщепление по физическим процессам [21, 22]. Сначала для каждой расчетной ячейки вычисляется изменение состава за счет сушки и пиролиза (8)–(10), затем определяется поле давлений и скоростей, которые подставляются в уравнения для диффузии и теплопроводности, затем поле температуры используется для уточнения химической подзадачи.

Таким образом, на каждом временном слое проводится согласование решений подзадач методом простой итерации. Условием остановки служит близость двух последовательно полученных приближений температурного профиля до 1 град. Расчеты показывают, что использование шага по радиусу $\Delta r = 2 \cdot 10^{-4}$ м и шага по времени $\Delta \tau = 1 \cdot 10^{-2}$ с позволяет получить достаточную точность вычислений. Характерные времена расчетов динамики одиночной частицы на персональном компьютере (в среде MATLAB) — порядка десятков минут, для совокупности частиц время вычислений примерно кратно их количеству.

Для описания пиролиза совокупности частиц задача дополняется согласованием граничных условий для подзадач отдельных частиц. Предполагается, что частицы последовательно расположены вдоль координаты слоя z , проходящей через их центры.

Температура и состав газа после взаимодействия с p -й частицей являются входящими параметрами при численном решении подзадачи для $(p + 1)$ -й частицы [8]. С этой целью вводятся уравнения теплового и массового баланса для газа в порозном пространстве:

$$\frac{\partial \rho_{env}^g}{\partial t} = -\frac{\partial G^g}{\partial z} + S_{env}^g, \quad (17)$$

$$c_p^g \rho_{env}^g \frac{\partial T_{env}}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial z} \left(\lambda^g \frac{\partial T_{env}}{\partial z} \right) - c_p^g G^g \frac{\partial T_{env}}{\partial z} + \frac{6(1 - \Pi_{bed}) Nu \lambda_g}{d_0} (T_{surf} - T_{env}). \quad (18)$$

В уравнениях (17) и (18) G^g — удельный массовый расход газа в сечении слоя, кг/м²/с; S^g — источник, связанный с массообменом между газом и частицами; Π_{bed} — порозность слоя (0.4 для хаотической засыпки); T_{surf} — температура поверхности частицы, которая находится при решении задачи теплопроводности в индивидуальной частице и равная значению $T(R)$ из уравнения (5). На входе в слой расход и температура греющего газа постоянны.

Предполагается, что теплообмен между соседними частицами происходит только через перенос теплового излучения, контактный теплообмен пренебрежимо мал. В этом случае в граничных условиях (6) под знаком суммы стоит суммарный лучистый тепловой поток между поверхностью частицы, окружающей средой (стенками аппарата) и участвующими в теплопереносе поверхностями других частиц. Коэффициент a_p равен доле поверхности, участвующей в теплообмене с p -м источником/стоком теплового излучения. В модели плотного слоя между собой обмениваются только частицы из соседних сечений (т. е. путь свободного пробега луча равен половине диаметра частицы), и коэффициент a_p равен 0.5. Рассеяние излучения в порозном пространстве не учитывается.

3. Валидация модели для одиночных частиц

Для проверки математической модели взяты экспериментальные данные из работ [18, 23]. В первом случае опыты проводились со сферическими частицами диаметром

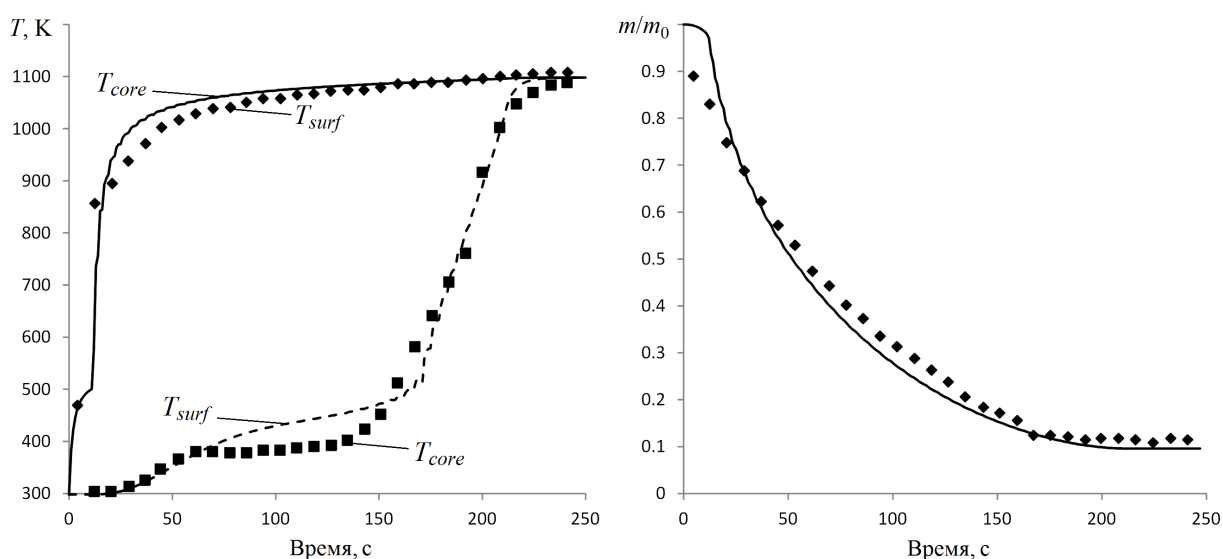


Рис. 1. Результаты численного моделирования и эксперимента [18]: сферический образец, $d_0 = 20$ мм, $W_{in} = 20$ %; значки — эксперимент, кривые — расчет

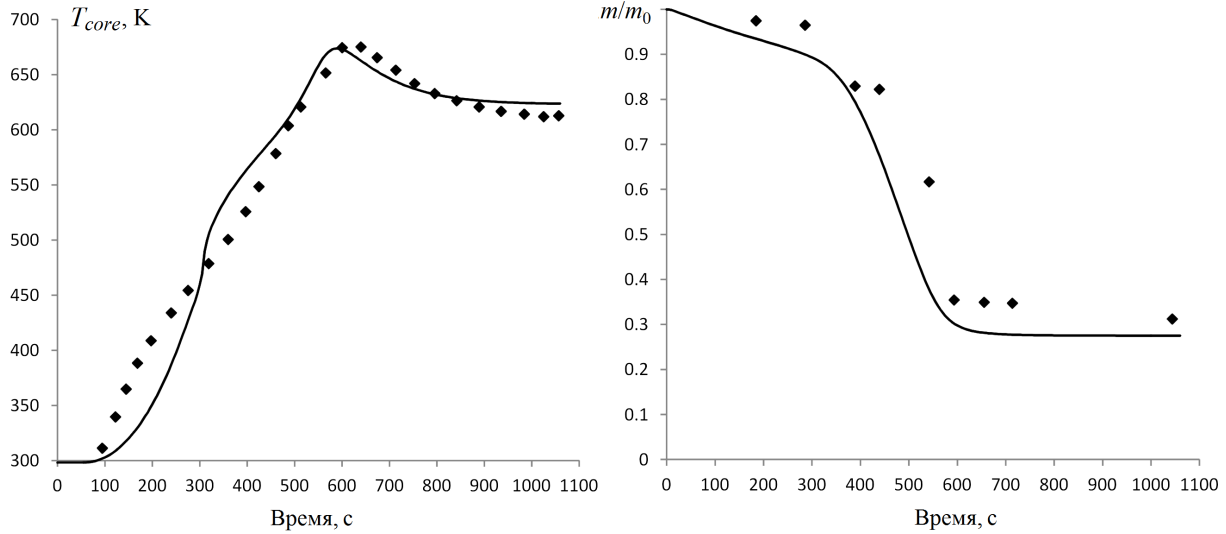


Рис. 2. Результаты численного моделирования и эксперимента [23]: цилиндрический образец, $d_0 = 20$ мм, $W_{in} = 7\%$; значки — эксперимент, кривые — расчет

$d_0 = 20$ мм и влажностью $W_{in} = 20\%$ (рис. 1). Во втором случае образцы были цилиндрической формы (фактор формы влияет на запись градиента температуры в уравнениях (1) и (2)) и с начальной влажностью 7% (рис. 2). На рисунках представлены расчетные и экспериментальные данные для температуры поверхности частицы T_{surf} , температуры в центре частицы T_{core} и относительной массы образца m/m_0 . Совпадение с экспериментом было признано удовлетворительным. Помимо погрешности численного решения здесь накладывается также и погрешность модели и выбора коэффициентов. Например, ход температуры на стадии прогрева цилиндрического образца (рис. 2) отличается от рассчитанной кривой: в данном случае, скорее всего, выбранная аппроксимация теплового эффекта начальной стадии пиролиза имеет высокую погрешность, хотя кривая убыли массы при этом малочувствительна к колебаниям температуры.

4. Численное моделирование пиролиза совокупности древесных частиц

Рассматривается модельная задача для пиролиза древесных частиц в плотном слое. Горячий инертный газ продувается через слой высотой в 8 сферических частиц размером 20 мм. Каждый слой представлен одной характерной частицей, которая определяет динамику разложения всего сечения.

Варьируемым параметром является расход горячего газа: в зависимости от его величины в систему подается разное количество теплоты. Однако при высоком расходе газообразного теплоносителя теплота расходуется менее эффективно (т. е. газ на выходе из слоя будет все еще горячим). Поэтому при проектировании пиролизеров (например, шнековых [24]) важно оценить оптимальные расходные характеристики.

На рис. 3 показана динамика изменения температуры частиц в разных сечениях слоя при расходе газа $G_0^g = 0.6$ кг/м²/с. Поверхность частиц достаточно быстро нагревается до температуры начала сушки, после чего нагрев лимитируется скоростью испарения влаги. После того как поверхностный слой высыхает, в нем начинается термическое разложение. Температура газа и частиц выравнивается за счет теплообме-

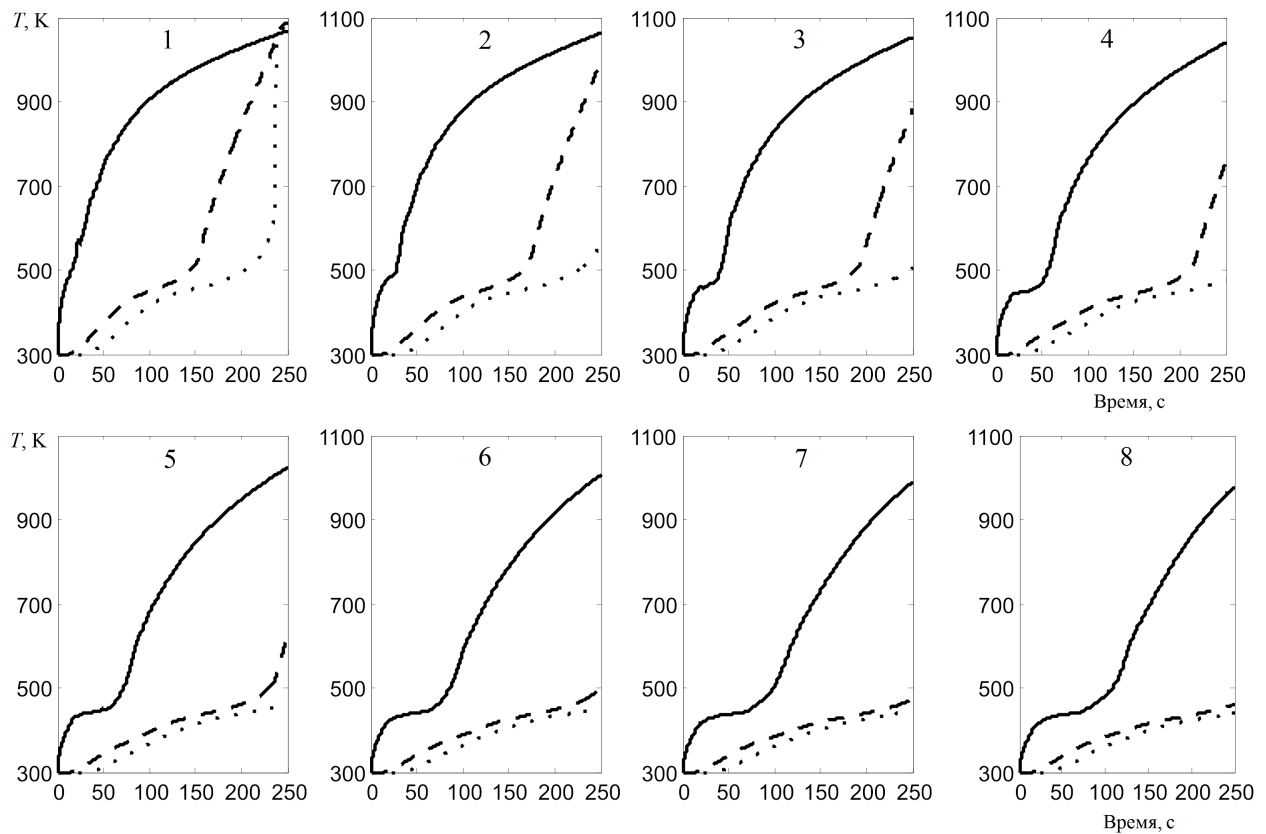


Рис. 3. Динамика изменения температуры частиц в разных сечениях слоя при $G_0^g = 0.6 \text{ кг/м}^2/\text{с}$ для точек $r = 0$ — пунктир, $r = R/2$ — штриховая кривая, $r = R$ — сплошная кривая; цифры 1–8 на графиках означают номер слоя по ходу движения греющего газа

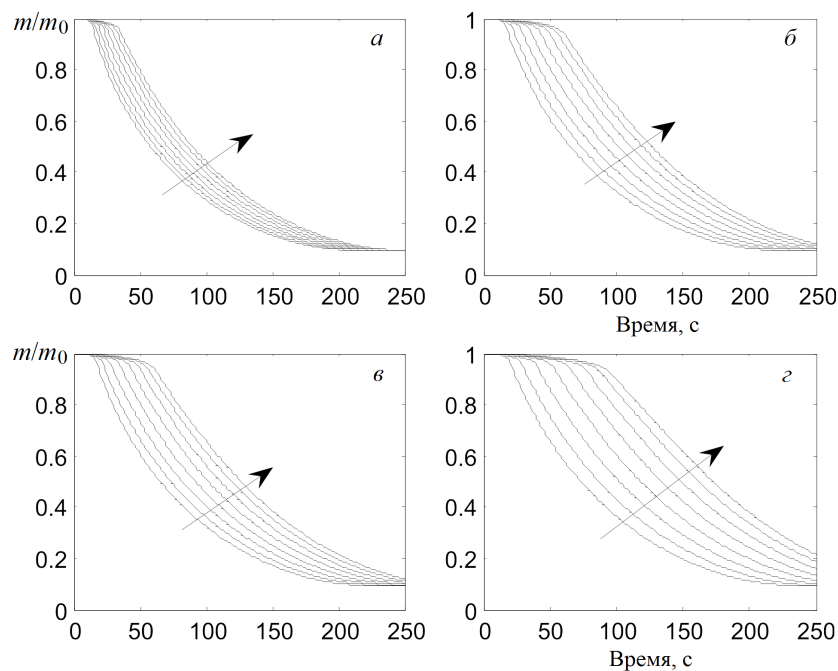


Рис. 4. Динамика убыли относительной массы древесных частиц (m/m_0) по высоте слоя при разных расходах греющего газа $G_0^g = 2.3$ (а), 1.2 (б), 0.8 (в), 0.3 (г) $\text{кг/м}^2/\text{с}$ (стрелкой обозначен порядок частиц по направлению движения газа)

на, поэтому по ходу продвижения газового потока скорость нагрева частиц (а значит, и скорость сушки и пиролиза) уменьшается. Поэтому к моменту, когда первая частица уже полностью обугливается, в частицах из областей слоя ниже по потоку газа еще продолжается сушка сердцевины.

Кривые изменения массы частиц представлены на рис. 4. При больших расходах греющего газа ($G_0^g = 2.3 \text{ кг/м}^2/\text{с}$) все частицы слоя прогреваются практически одновременно. При уменьшении расхода теплоносителя до $1.2 \text{ кг/м}^2/\text{с}$ частицы успевают прореагировать за отведенное время, однако дисперсия увеличивается. При расходе $0.3 \text{ кг/м}^2/\text{с}$ последняя частица взаимодействует с сильно остывшим газом, поэтому почти не успевает прореагировать полностью. Таким образом, влияние внутренних и внешних тепломассообменных процессов приводит к различиям в степени превращения частиц, которые наблюдаются на практике [25].

Выводы

Предложена математическая модель для исследования процесса термического разложения слоя древесных частиц при нагреве фильтрующимся горячим газом. Учет внутреннего и внешнего тепломассопереноса позволяет проследить влияние параметров процесса на конверсию отдельных частиц и оценить условия (расход теплоносителя, время контакта), необходимые для достижения требуемой степени превращения.

Такая модель может быть использована для анализа и оптимизации процессов термической конверсии древесного топлива в пиролизерах, топках (на стадиях сушки топлива и выхода летучих). Дальнейшее развитие этой модели может быть связано с учетом процессов, обусловленных выделением смолистых продуктов, агломерацией и раскрекиванием частиц, а также дополнением реакционной схемы химическими реакциями окисления летучих и древесного угля, которые имеют место в топках (на стадии горения) и газогенераторах.

Благодарности. Работа выполнена при финансовой поддержке РФФ (проект № 16-19-10227) с использованием оборудования центра коллективного пользования ИСЭМ СО РАН “Высокотемпературный контур”.

Список литературы / References

- [1] Кузнецов В.Т., Фильков А.И. Воспламенение различных видов древесины потоком лучистой энергии // Физика горения и взрыва. 2011. Т. 47, № 1. С. 74–79.
Kuznetsov, V.T., Fil'kov, A.I. Ignition of various wood species by radiant energy // Combustion, Explosion and Shock Waves. 2011. Vol. 47, No. 1. P. 65–69.
- [2] Hupa, M., Karlstrom, O., Vainio, E. Biomass combustion technology development — It is all about chemical details // Proc. of the Combustion Institute. 2017. Vol. 36, No. 1. P. 113–134.
- [3] Papari, S., Hawboldt, K. A review on the pyrolysis of woody biomass to bio-oil: Focus on kinetic models // Renewable and Sustainable Energy Rev. 2015. Vol. 52. P. 1580–1595.
- [4] Ruey-Jia Lin, B.S. A macro-particle, moving-boundary pyrolysis model. MSc Thesis. Texas Technical Univ., 1993. 137 p.
- [5] Bamford, C.H., Crank, J., Malan, D.H. The combustion of wood. Pt I // Math. Proc. of the Cambridge Philosophical Soc. 1946. Vol. 42, No. 2. P. 166–182.
- [6] Pyle, D.L., Zaror, C.A. Heat transfer and kinetics in the low temperature pyrolysis of solids // Chemical Eng. Sci. 1984. Vol. 39, No. 1. P. 147–158.

- [7] **Di Blasi, C.** Modeling chemical and physical processes of wood and biomass pyrolysis // Progress in Energy and Combustion Sci. 2008. Vol. 34. P. 47–90.
- [8] **Ranzi, E., Corbetta, M., Manenti, F., Pierucci, S.** Kinetic modeling of the thermal degradation and combustion of biomass // Chemical Eng. Sci. 2014. Vol. 110. P. 2–12.
- [9] **Anca-Couce, A.** Reaction mechanisms and multi-scale modelling of lignocellulosic biomass pyrolysis // Progress in Energy and Combustion Sci. 2016. Vol. 53. P. 41–79.
- [10] **Hankalin, V., Ahonen, T., Raiko, R.** On thermal properties of a pyrolysing wood particle // Proc. of the IFRF Finnish-Swedish Flame Days (28–29 January 2009, Naantali, Finland). 2009. 16 p.
- [11] **Hagge, M.J.** A numerical model of biomass pyrolysis. PhD Thesis. Iowa State Univ., 2005. 178 p.
- [12] **Wiggins, G.M., Ciesielski, P.N., Daw, C.S.** Low-order modeling of internal heat transfer in biomass particle pyrolysis // Energy Fuels. 2016. Vol. 30, No. 6. P. 4960–4969.
- [13] **Strom, H., Thunman, H.** A computationally efficient particle submodel for CFD-simulations of fixed-bed conversion // Applied Energy. 2013. Vol. 112. P. 808–817.
- [14] **Gomez, M.A., Porteiro, J., Patino, D., Miguez, J.L.** Fast-solving thermally thick model of biomass particles embedded in a CFD code for the simulation of fixed-bed burners // Energy Conversion and Management. 2015. Vol. 105. P. 30–44.
- [15] **Papadikis, K., Gu, S., Brigwater, A.V.** CFD modelling of the fast pyrolysis of biomass in fluidized bed reactors: Modelling the impact of biomass shrinkage // Chemical Eng. J. 2009. Vol. 149. P. 417–427.
- [16] **Mahmoudi, A.H., Hoffmann, F., Peters, B.** Detailed numerical modeling of pyrolysis in a heterogeneous packed bed using XDEM // J. of Analytical and Appl. Pyrolysis. 2014. Vol. 106. P. 9–20.
- [17] **Wiese, J., Wissing, F., Hohner, D. et al.** DEM/CFD modeling of the fuel conversion in a pellet stove // Fuel Proc. Technology. 2016. Vol. 152. P. 223–239.
- [18] **Wurzenberger, J.C., Wallner, S., Raupenstrauch, H., Khinast, J.G.** Thermal conversion of biomass: comprehensive reactor and particle modeling // American Institute of Chemical Eng. J. 2002. Vol. 48, No. 10. P. 2398–2411.
- [19] **Козлов А.Н., Свищев Д.А., Худякова Г.И., Рыжков А.Ф.** Кинетический анализ конверсии твердых топлив (обзор) // Химия твердого топлива. 2017. № 4. С. 12–21.
Kozlov, A.N., Svishchev, D.A., Khudiakova, G.I., Ryzhkov, A.F. A kinetic analysis of the thermochemical conversion of solid fuels (a review) // Solid Fuel Chemistry. 2017. Vol. 51, No. 4. P. 205–213.
- [20] **Basile, L., Tugnoli, A., Stramigioli, C., Cozzani, V.** Thermal effects during biomass pyrolysis // Thermochimica Acta. 2016. Vol. 636. P. 63–70.
- [21] **Патанкар С.** Численные методы решения задач теплообмена и динамики жидкости. М.: Энергоатомиздат, 1984. 152 с.
Patankar, S.V. Numerical heat transfer and fluid flow. CRC Press, 1980. 200 p.
- [22] **Donskoy, I.G., Shamansky, V.A., Kozlov, A.N., Svishchev, D.A.** Coal gasification process simulations using combined kinetic-thermodynamic models in one-dimensional approximation // Combustion Theory and Modelling. 2017. Vol. 21, No. 3. P. 529–559.
- [23] **Koufopoulos, C.A., Papayannakos, N., Maschio, G., Lucchesi, A.** Modelling of the pyrolysis of biomass particles. Studies on kinetics, thermal and heat transfer effects // The Canadian J. of Chemical Eng. 1991. Vol. 69. P. 907–915.
- [24] **Kozlov, A., Levin, A., Svishchev, D.** Modeling of pyrolysis in a stage scheme of low-grade solid fuel gasification // Pyrolysis / Ed. by M. Samer. InTech, 2017. P. 71–88.

- [25] Svishchev, D.A., Kozlov, A.N., Donskoy, I.G., Ryzhkov, A.F. A semi-empirical approach to the thermodynamic analysis of downdraft gasification // Fuel. 2016. Vol. 168. P. 91–106.

Поступила в редакцию 30 марта 2018 г.

Mathematical modelling of woody particles pyrolysis in a fixed bed

DONSKOY, IGOR G.

Melentiev Institute of Energy Systems SB RAS, Irkutsk, 664033, Russia

Corresponding author: Donskoy, Igor G., e-mail: donskoy.chem@mail.ru

The development of new energy technologies requires the improvement of mathematical models to describe the physical and chemical processes taking place in power plants. The process of wood particles fixed-bed pyrolysis is investigated in this paper: this process takes place both in the traditional combustion of wood fuels in fixed-bed boilers and in energotechnology processes aimed at producing combustible gases and chemical products (tar, charcoal).

The problem of pyrolysis of a set of successively located wood particles is considered. Each particle is considered as an object with an internal distribution of temperature, pressure and concentrations. A system of equations is constructed for a single particle, including external heat and mass transfer between the particles and the ambient gas flow combined with internal physicochemical processes (heat conduction, diffusion, filtration, drying and chemical brutto-reaction of the organic mass decomposition producing gases and solid residue). The temperature of the gas in the pores of the particles is equal to the temperature of the solid. Using the model of pyrolysis of a single particle, it is possible to reproduce the known experimental data.

The mathematical model of a fixed-bed pyrolysis is based on submodels of single particles, conjugated over heat and mass flows. The interaction between the particles composing the layer is reduced to heat fluxes: radiant heat transfer between the surfaces of adjacent particles occurs in the bed, as well as convective heat transfer between the heated gas and particles. The result is that each next particle layer is heated at a smaller temperature difference. On the one hand, the intensity of heat transfer decreases, on the other hand, the efficiency of using heat increases.

The results of numerical calculations make it possible to study the dynamic behavior of particles in a fixed bed, which is of interest in the design of small power plants using biofuels.

Keywords: biomass, solid fuel, single particle, fixed bed, pyrolysis, transfer processes.

Cite: Donskoy, I.G. Mathematical modelling of woody particles pyrolysis in a fixed bed // Computational Technologies. 2018. Vol. 23, No. 6. P. 14–24. (In Russ.)

DOI: 10.25743/ICT.2018.23.6.003.

Acknowledgements. This work was carried out with financial support of the RSF (project No. 16-19-10227) and using equipment of the multi-access scientific center at the Melentiev Energy Systems Institute of SB RAS “High Temperature Circuit”.

Received 30 March 2018