

文章编号:1006-3080(2013)04-0419-08

# 木质纤维素预处理物系的流变学特性表征以及 计算流体力学模拟

乔庆安, 李传航, 张 建, 鲍 杰

(华东理工大学生物反应器工程国家重点实验室, 上海 200237)

**摘要:**预处理是木质纤维素生物炼制中的关键环节。传统的预处理一般在实验室规模的小尺度条件下进行,并未考虑大尺度反应器内的搅拌及搅拌桨型式对混合、传热和传质及预处理效果的影响。研究了在无游离水相存在的干式稀酸预处理反应器中,引入螺带搅拌桨强化混合和传递的可行性,对由固体玉米秸秆颗粒构成的固相体系进行了“拟流体”假设,针对木质纤维素吸水性强、流变学特性无法直接测定的特点,通过测定搅拌体系的扭矩值间接获得秸秆物系的表观黏度( $\eta_a$ )和表观剪切速率( $\gamma_{\text{eff}}$ ),从而获得了表征秸秆物系虚拟流体的流变指数( $n$ )和稠度系数( $K_{\text{pl}}$ );建立了干式预处理过程的计算流体力学(CFD)模型,并通过比对秸秆物系冷模实验和CFD模型计算的功率消耗和混合时间,验证了所建模型的准确性。CFD模拟和冷模实验的结果表明在无游离水相存在的干式预处理反应器中引入螺带搅拌桨进行强化混合和传递是可行的,并为带有搅拌的预处理反应器的放大和加工提供了依据。

**关键词:**木质纤维素拟流体;流变学参数;干式预处理;计算流体力学(CFD);螺带搅拌桨  
**中图分类号:**TQ018 **文献标志码:**A

## Characterization of Rheological Properties of Pseudo Corn Stover Fluid and Computational Fluid Dynamics Simulation

QIAO Qing-an, LI Chuan-hang, ZHANG Jian, BAO Jie

(State Key Laboratory of Bioreactor Engineering, East China University of Science and  
Technology, Shanghai 200237, China)

**Abstract:** Pretreatment is the most important step during biochemical conversion of lignocellulose to biofuels and biochemicals. However, lack of mixing in the conventional pretreatment process resulted in the deficiency of mixing, heat- and mass-transfer, the non-conformity of the pretreatment intensity, and thus led to the partial insufficient of lignocellulose structure decomposition, and partial excessive decomposition of the lignocellulose structure to generate inhibitors, which in turn impeded the subsequent enzymatic hydrolysis and microbial fermentation. This study aims to demonstrate the viability of introducing helical-impeller mixing into the dry dilute sulfuric acid pretreatment process. Firstly, considering the high ability of water-adsorption and the resulted difficulty of rheological property characterization of the corn stover system, the rheological property parameters of flow index ( $n$ ) and the

收稿日期:2012-12-05

基金项目:国家重点基础研究发展计划“973”计划(2011CB707406);国家“863”项目(2012AA022301);国家自然科学基金(20976051);教育部博士点基金(20090074110013);中国博士后基金(2011M500742/2012T50380/2012M520850);中央高校基本科研业务费专项资金(WF0913005/1114054/1214025);上海市重点学科建设项目(B505)

作者简介:乔庆安(1964-),男,吉林农安人,博士生,主要从事新能源与化工过程方向研究。E-mail: jh\_qiaoqa@petrochina.com.cn

通信联系人:鲍 杰, E-mail: jbao@ecust.edu.cn

consistency coefficient ( $K_{pl}$ ) were obtained through calculating the apparent viscosity ( $\eta_a$ ) and the apparent shearing rate ( $\gamma_{eff}$ ) of the corn stover system according to the power law model. Furthermore, CFD models of the dry dilute sulfuric acid pretreatment in a helical stirring bioreactor using the obtained rheological property parameters were constructed, and the CFD simulation results were in agreement with the cold-mold results in three different scale bioreactors. The results of both CFD simulation and cold-mold experiments showed that the practicability of introducing helical impeller into the dry dilute sulfuric acid pretreatment bioreactor.

**Key words:** lignocellulosic pseudo-fluid; rheology parameters; dry pretreatment; Computational Fluid Dynamics (CFD); helical stirring impeller

在木质纤维素的生物加工过程中,预处理是突破木质纤维素生物质自身保护性屏障的必不可少的手段,并影响后续的抑制物脱除(脱毒)、酶水解(糖化)、发酵、产物分离、废弃物处理和副产物生成等诸工段的效率<sup>[1]</sup>,可以说,预处理是整个木质纤维素生物炼制过程中最关键的环节<sup>[2]</sup>。但是,传统的预处理反应器一般缺乏有效的混合和传递机制,导致反应器内部预处理强度不均一,造成局部预处理强度不足,后续酶解效率低下;而局部原料过度降解,生成大量抑制物。此外,在缺乏有效混合的预处理体系中,高温蒸汽很容易在物料中形成空洞,造成预处理重复性差和蒸汽利用效率低等问题。上述问题对于液固比较高的预处理体系(即液体充满反应器的情况),或者在实验室等小尺度的预处理反应器中,表现并不十分严重。但是,当体系液固比极低以至于体系无游离水存在时,或在放大尺度的中试或产业化规模预处理反应器中,问题则会完全显现。目前木质纤维素预处理技术大多处于实验室规模或中试规模,已有的所谓工业示范由于成本核算上的亏损,仅是不定期运行的装置,并无实际工业生产意义,因此面向实际工业生产的装置和技术尚未提到一个重要的地位;另一方面,目前的大多数预处理技术都在含水量很高的体系中进行,因而在预处理体系的混合方面不是一个特别突出的问题。目前预处理反应器基本都是在静态条件下进行的,对于搅拌和混合鲜有涉及。

我们前期工作中提出的面向木质纤维素产业化生物加工过程的干法生物炼制技术,大幅度提高了预处理前木质纤维素固体原料的预浸固液比,达到传统预处理的 10~20 倍,预处理后物料的水含量降低至无游离水相存在,这是一种典型的需要混合和传递强化的技术<sup>[3]</sup>。本文结合实验室前期工作开发的螺带型搅拌技术,通过预处理过程体系流变学性能表征和计算流体力学(CFD)模拟,并结合冷模

实验,探讨了在极限低水预处理反应器中通过引入螺带型搅拌来强化过程汽-固-液之间的混合、传热、传质和增加预处理物料的均匀性和可重复性<sup>[3-7]</sup>。

对木质纤维素体系的流变学特性进行表征是进行计算流体力学模拟的基础。在以往的对木质纤维素体系的研究中,“拟流体”假设是一种常用的做法,即将离散的木质纤维素固体颗粒或含固相木质纤维素颗粒的浆液视为一种虚拟的连续相流体。Viamajala 等<sup>[8]</sup>对固体质量分数在 10%~40%时的原始和稀酸预处理后的玉米秸秆流变学进行了研究,用卡森模型对玉米秸秆进行了表征。当固体质量分数为 30%~40%时,物料浆液就变成了湿的粒状材料;当固体质量分数高于 40%时,游离水完全消失,原料即表现为难以剪切和混合。在质量分数较高的预处理过程中,预处理后原料的水含量高达 50%,已无游离水存在,一般基于流变仪测定的流变学已不能适用,需要采用间接测量已知流变学性质的牛顿和非牛顿校正用流体,将扭矩、转速、剪切速率和剪切应力关联起来。Kemblowski 和 Kristiansen<sup>[9]</sup>借助间接测量方法对固体质量分数高的发酵液进行了流变学表征;Pimenova 和 Hanley 等<sup>[10-11]</sup>使用安装有搅拌桨的流变仪,对固体质量分数高的玉米秸秆悬浮液浆的表现黏度和剪切速率进行了表征。目前,对木质纤维素体系的流变学研究都集中在糖化和发酵阶段,报道的最高固体质量分数不超过 40%,鲜有对固体质量分数超过 50%的木质纤维素体系的流变学性质表征的研究报道<sup>[10-16]</sup>,对于预处理过程中秸秆体系的流变学特性研究则相对较少。

基于上述分析,本研究首先对木质纤维素的流变学性质表征方法进行了改进,获得了较为准确的质量分数较高的玉米秸秆物系的流变学参数;然后建立了螺带搅拌式干式稀酸预处理过程的 CFD 模型,并对比了不同尺度预处理反应器的冷模实验数

据对 CFD 模型的模拟结果,验证了所建立的 CFD 模型的正确性,为带有螺带搅拌的干式预处理反应器的设计和放大提供了理论支持。

## 1 材料和方法

### 1.1 实验材料

预处理热模和冷模实验所使用玉米秸秆产于中国吉林省,由 SF-300 型锤式粉碎机粉碎并清洗烘干,秸秆粒径为 1~10 mm,放入真空袋中保存备用。预处理玉米秸秆根据 Zhang 等<sup>[3]</sup>所报道的干式稀酸预处理方法制备,即用质量分数为 5% 的稀硫酸与烘干后的玉米秸秆充分混合(固液质量比为 2:1),并预浸 12 h,然后放入预处理反应器中,高温蒸汽喷射进入反应器,于 190 °C、1.2 MPa 的条件下维持 3 min,取出物料冷却后放入 105 °C 烘箱烘干,于真空袋中保存备用。

冷模实验标准流体玉米糖浆(Corn syrup)购自上海好成食品发展有限公司,羧甲基纤维素钠(Carboxy Methyl Cellulose, CMC)购自国药集团化学试剂有限公司,并用去离子水分别配成质量分数为 2% 和 4% 的水溶液。

### 1.2 流体力学冷模反应器

流体力学冷模反应器为有机玻璃制成的圆柱形平底反应器。3 个不同尺度的冷模反应器均安装有由不锈钢制作的正螺旋螺带搅拌桨(见图 1),通过支撑轴固定在中心搅拌轴上。各冷模反应器及其螺带搅拌桨的几何参数见表 1,其中反应器 I 为直径 170 mm 的冷模反应器,容积约 5 L;反应器 II 为直径 384 mm 的冷模反应器,容积约 100 L;反应器 III

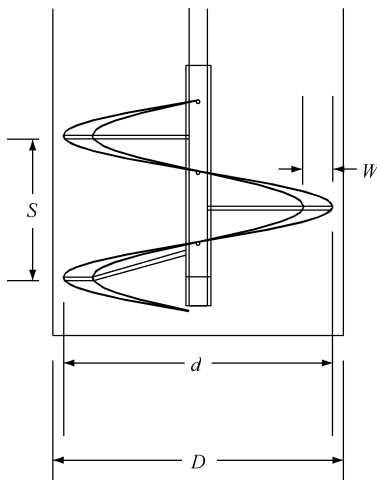


图 1 冷模反应器及其螺带桨示意图

Fig. 1 Schematic diagram of the mock-up bioreactor and its accessory helical impeller

为直径 786 mm 的冷模反应器,容积约 500 L;  $N_r$  为螺带桨的螺周数。

表 1 3 个不同尺度冷模反应器及其螺带型搅拌桨参数

Table 1 Dimensional parameters of the three bioreactors and their helical impellers

Reactor type	D/mm	d/D	W/d	S/d	$N_r$
I	170	0.90	0.10	0.5	1
II	384	0.90	0.10	0.5	1
III	786	0.90	0.10	0.5	1

### 1.3 搅拌功率和混合时间的表征

冷模反应器的马达和搅拌轴之间都安装有 HX-901 型扭矩测定仪(北京三河燕郊华欣机电有限公司)。搅拌过程中在不同转速下读取未加物料时扭矩测定仪的读数,并记录为  $T_{i0}$ ;然后加入物料或流体溶液,控制温度,读取扭矩测定仪的读数,记录为  $T_i$ ,由公式(1)计算得到不同实验条件下螺带搅拌桨的搅拌功率:

$$P = (T_i - T_{i0}) \times 2\pi \times v/60 \quad (1)$$

其中  $P$  为螺带搅拌桨的搅拌功率, W;  $v$  为螺带搅拌桨的搅拌转速, r/min;  $T_{i0}$  和  $T_i$  分别为空载和加载物料时的扭矩测定值, N·m。

冷模实验中以玉米秸秆的水含量作为表征混合时间的指标。首先向冷模反应器中加入一定量去离子水,使完全混合均匀后体系的水含量为 50%,然后加入干基玉米秸秆并开启搅拌。在某时刻取样,对样品称重,记为  $m_1$ ;在 105 °C 下烘干至恒重,称重,记为  $m_2$ ;承载样品的玻璃平板质量记为  $m_0$ 。每次取样量约为 2.0 g。所取样品水含量  $w_{H_2O}$  由公式(2)计算获得:

$$w_{H_2O} = \frac{m_1 - m_2}{m_1 - m_0} \times 100\% \quad (2)$$

### 1.4 黏度的测定

标准流体溶液的流变学性质均由 ARES 高级流变扩展系统(美国 TA 仪器公司)测得;质量分数为 2% 和 4% 的羧甲基纤维素钠(CMC)水溶液的流变参数由测得的数据拟合得到,各标准流体溶液的流变学参数见表 2。

### 1.5 玉米秸秆物系表观黏度( $\eta_a$ )的推导

幂律模型被广泛应用于描述非牛顿流体的流变学性质,其基本方程为:

$$\eta_a = K_{pl} \cdot \gamma_{eff}^{n-1} \quad (3)$$

两边取对数,可得:

$$\lg \eta_a = \lg K_{pl} + (n-1) \lg \gamma_{eff} \quad (4)$$

$K_{pl}$  值越大,流体的黏性越大;当已知  $\eta_a$  和  $\gamma_{eff}$  时,即可拟合出  $K_{pl}$  和  $n$  的值。

表 2 标准牛顿流体和非牛顿流体溶液的流变学参数  
Table 2 Rheological properties of the standard Newtonian and non-Newtonian fluids

Fluid solution	Properties	$n$	$K_{pl}/(\text{Pa} \cdot \text{s}^n)$
Corn syrup I	Newtonian	1.000	6.687
Corn syrup II	Newtonian	1.000	3.168
Glycerol I	Newtonian	1.000	1.200
Glycerol II	Newtonian	1.000	0.844
CMC aqueous solution( $w_{CMC}=2\%$ )	Non-Newtonian	0.457	16.740
CMC aqueous solution( $w_{CMC}=4\%$ )	Non-Newtonian	0.564	20.280

Corn syrup I and II represent the rheological parameters of corn syrup measured at 25.0 °C and 31.0 °C, respectively; Glycerol I and II represent the rheological parameters of glycerol measured at 23.0 °C and 27.0 °C, respectively; The unit of  $K_{pl}$  was  $\text{Pa} \cdot \text{s}^n$ , in which  $n$  corresponded to the index number of non-Newtonian fluid

在搅拌层流区( $Re_m < 30$ ),搅拌功率准数  $N_p$  与搅拌雷诺数  $Re_m$  存在如下关系:

$$N_p = \frac{C}{Re_m} \quad (5)$$

其中  $C$  与搅拌系统的桨叶几何参数有关,而与搅拌体系的物料性质无关。

搅拌功率准数定义为:

$$N_p = \frac{P}{\rho N^3 d^5} \quad (6)$$

搅拌功率  $P$  可由搅拌转速  $N$  和扭矩  $M$  求得:

$$P = 2\pi NM \quad (7)$$

对于已知黏度的牛顿流体,其搅拌雷诺数可由下式求得:

$$Re_m = \frac{\rho N d^2}{\mu} \quad (8)$$

联立式(5)~(8)可得:

$$C = \frac{2\pi M_1}{\mu N d^3} \quad (9)$$

对于非牛顿流体,其搅拌雷诺数可以表示为:

$$Re_m = \frac{\rho N d^2}{\eta_a} \quad (10)$$

联立式(5)~式(7)和式(10)可得:

$$\eta_a = \frac{2\pi M_2}{C N d^3} \quad (11)$$

## 1.6 玉米秸秆物系有效剪切速率( $\gamma_{eff}$ )的推导

根据 Metzner 和 Otto 提出的平均表观黏度的概念<sup>[17]</sup>,表观剪切速率( $\gamma_{eff}$ )与搅拌转速( $N$ )之间存

在以下关联:

$$\gamma_{eff} = K_s \cdot N \quad (12)$$

其中  $K_s$  取决于搅拌桨的形式,对一个特定的搅拌桨可通过实验求得。Delaplace 等<sup>[18]</sup>发现,在较窄的流变指数( $0.45 < n < 0.75$ )范围内, $K_s$  随流变指数的变化很小,在实际的应用计算中可以忽略不计,并推导出了螺带型搅拌桨中剪切变稀流体的  $K_s$  计算关系式,即式(13):

$$K_s = \frac{2}{N_r} \times \frac{S_e^{2/n}}{S^2} \times \frac{S_e^2 - 1}{S_e^{2/n} - 1} \times \frac{C}{\pi^2 (l/d)} \times \left[ \frac{n}{2-n} \times \frac{S_e^{2/n-1}}{S-1} \right]^{1/(n-1)} \quad (13)$$

其中  $S_e$  可通过式(14)求得,

$$S_e = \frac{D}{d_e} = \frac{D/d}{D/d - \frac{2w/d}{\ln \left[ \frac{D/d - (1 - 2w/d)}{D/d - 1} \right]}} \quad (14)$$

将方程(12)代入取对数后的幂律模型(3)可得(15):

$$\lg \eta_a = \lg K_{pl} + (n-1) \cdot \lg(K_s \cdot N) \quad (15)$$

当获得两组不同转速下体系的表观黏度时,变换方程(15)可消去  $K_{pl}$ ,通过  $\lg \eta_a$  和  $\lg N$  求得流变指数  $n$ :

$$n-1 = \frac{\lg \eta_{a1} - \lg \eta_{a2}}{\lg K_s N_1 - \lg K_s N_2} = \frac{\lg \eta_{a1} - \lg \eta_{a2}}{\lg N_1 - \lg N_2} \quad (16)$$

## 2 结果与讨论

### 2.1 玉米秸秆物系的流变学特性表征

本文根据流变学参数计算方法,将玉米秸秆物系假设为“拟流体”的体系,即认为木质纤维素物系为均一的流体,并结合玉米秸秆的吸水特性对幂律模型进行了修正<sup>[9-11]</sup>,用于表征固体质量分数较高的玉米秸秆物系的流变学特性。

2.1.1 表观黏度( $\eta_a$ )的计算 从公式(9)和(11)可以看出,在特定转速下,测出某一已知表观黏度为  $\mu$  的牛顿流体的扭矩  $M_1$ ,再测得冷漠实验中秸秆在同一转速下的扭矩  $M_2$ ,即可求得秸秆在该转速下的表观黏度  $\eta_a$ 。

经计算,在螺带桨反应器中,当转速在 50~130 r/min 时,6 种不同黏度标准流体的  $M_1/\mu$  值误差均小于 10%,表明螺带式搅拌反应器与其他搅拌体系相同, $C$  值取决于搅拌槽的几何参数,而与流体性质无关。为了确保实验的准确性,取 6 种不同黏度标

准流体  $M_1/\mu$  的平均值作为 Reactor I 在某一转速下的  $M_1/\mu$  值。据此,测得水含量为 50% 玉米秸秆在不同转速下的搅拌扭矩,并根据方程(11)可求得其表观黏度  $\eta_a$  (见图 2)。

由图 2 可知,随着搅拌转速的增加,从 50 r/min 增加到 130 r/min,搅拌浆所产生的扭矩值  $M_2$  随之增加,但玉米秸秆的表观黏度却逐渐降低。这也表明水含量为 50% 的玉米秸秆体系可以被看作一个剪切变稀的非牛顿流体体系。

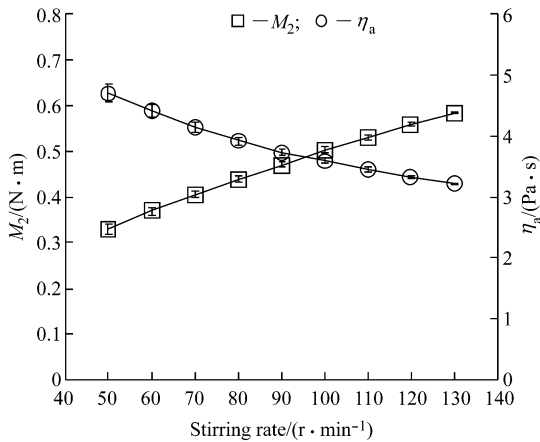


图 2 玉米秸秆的表观黏度计算 ( $w_{H_2O} = 50\%$ )

Fig. 2 Calculation of the apparent viscosity of corn stover ( $w_{H_2O} = 50\%$ )

2.1.2 表观剪切速率  $\gamma_{eff}$  的计算 通过方程(15)求得 Metzner 常数  $K_s$ ,通过方程(15)~(16)计算 50% 水含量玉米秸秆的  $n$ ,见表 3。根据方程(12)求出不同转速下表观剪切速率  $\gamma_{eff}$  的值。

2.1.3 流变指数  $n$  和稠度系数  $K_{pl}$  的计算 通过前述已经求得的每一转速下的表观黏度  $\eta_a$  和表观剪切速率  $\gamma_{eff}$ ,根据方程(3)即可拟合出稠度系数  $K_{pl}$  的值。预处理之前的玉米秸秆体系(CS)以及预处理之后的物系(PCS)的流变学参数见表 3。

表 3 预处理前后玉米秸秆的流变学参数

Table 3 Rheological parameters of the CS and PCS ( $w_{H_2O} = 50\%$ )

Materials	$n$	$K_s$	$K_{pl}$	$R^2$
CS	0.599	33.958	18.113	0.999 5
PCS	0.504	32.758	33.900	0.988 3

## 2.2 干式预处理过程的流体力学冷模实验和 CFD 模拟

获得不含游离水相的玉米秸秆物系的流变学参数后,即可对其建立计算流体力学(CFD)模型,对干式预处理过程的汽液和固液混合过程的混合时间与

搅拌功耗两个重要指标进行计算,并与冷模实验结果进行对比。

2.2.1 螺带搅拌预处理反应器计算流体力学模型的建立 由于本研究模拟的是无游离水相的固体质量分数高的玉米秸秆的预处理过程,为了简化模型,对模型的假设包括:

- (1)不考虑固液混合过程的温度变化;
- (2)玉米秸秆与水的混合过程无化学反应;
- (3)秸秆与水的混合体系为不可压缩流体的层流流动(最大搅拌雷诺数为 259.78,可以使用层流模型<sup>[19]</sup>)。所使用的软件为 CFX11.0 (ANSYS Inc.),采用基于有限元的有限体积法对本构方程进行离散,采用多重参考坐标系法(MRF)来处理旋转的动区与静区之间的相互作用。

在本文的流体力学计算模型中,忽略重力影响,设定自由面为平面。边界条件设置如下:(1)搅拌桨及搅拌轴:动边界,壁面无滑移,搅拌桨及动区内的搅拌轴相对于动区内流体是静止的,静区内的搅拌轴相对于静区内流体是运动的;(2)搅拌槽壁面:静止壁面,无滑移;(3)液面:自由滑移。

以 5、100 和 500 L 3 个搅拌反应器为研究对象(结构参数见表 1),采用 ICEM CFD 软件对搅拌槽进行网格划分,动区为非结构化四面体网格,静区为六面体网格。使用黏度为 10 Pa·s 的流体对网格进行了无关性验证,以功率准数  $N_p$  为参考对象,验证结果见表 4。从表 4 可以看出,当网格数目足够多时,模拟所得功率准数的变化很小,可以认为网格数目对计算结果基本无影响。而 100 L 和 500 L 的搅拌反应器经网格无关性验证也可得到相同的实验结果。

以 5、100 和 500 L 3 个搅拌反应器为研究对象(结构参数见表 1),采用 ICEM CFD 软件对搅拌槽进行网格划分,动区为非结构化四面体网格,静区为六面体网格。使用黏度为 10 Pa·s 的流体对网格进行了无关性验证,以功率准数  $N_p$  为参考对象,验证结果见表 4。从表 4 可以看出,当网格数目足够多时,模拟所得功率准数的变化很小,可以认为网格数目对计算结果基本无影响。而 100 L 和 500 L 的搅拌反应器经网格无关性验证也可得到相同的实验结果。

表 4 网格数对功率准数  $N_p$  的影响 (Reactor I)

Table 4 Effect of numerical grids on power number (Reactor I)

Case	Total node numbers	$N_{p-sim}$	$(N_{p-sim} - N_{p-exp})/N_{p-exp}$
1	23 618	42.87	8.37%
2	47 865	41.98	6.12%
3	89 387	41.47	4.83%
4	151 645	41.36	4.55%
5	326 738	41.25	4.17%

$N_{p-sim}$  represents the power number obtained by calculation;  $N_{p-exp}$  represents the power number obtained by experiment

2.2.2 干式稀酸预处理过程的 CFD 模型验证 搅拌功率是反应器设计中的一个重要参数,直接影响到反应器设计时的电机选型和功耗。CFD 模拟

可以方便快速地模拟混合过程并得到过程的功率消耗。图 3 表示 50% 水含量玉米秸秆在 3 个不同尺度搅拌槽中的冷模实验所得功率与所建数学模型模拟得到功率的对比。分析图 3 可知,随着搅拌转速的增加,冷模实验所得搅拌功率和 CFD 模型模拟得到功率均呈增加趋势;而且,在同样的转速下,两者的偏差很小。其中 5 L 和 100 L 两个反应器中的偏差在 10% 以内(图 3(a)~(b));500 L 反应器中的偏差在 15% 以内(图 3(c))。功率模拟的结果表明,通过计算流体力学模型能够较好地预测带有螺带搅拌的干式稀酸预处理过程的功率消耗,并为带有螺带搅拌的预处理反应器的放大提供依据。

混合时间也是表征反应体系混合效率的一个很

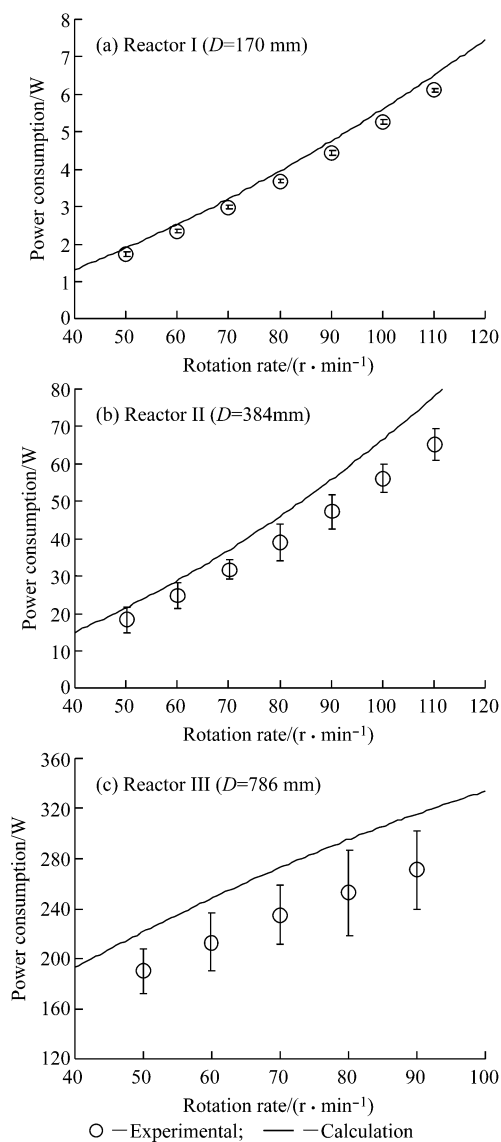


图 3 冷模试验与 CFD 模型计算所得搅拌功耗的对比

Fig. 3 Comparison of power consumption during mixing of solid CS with water between experimentations and simulation using CFD models in different reactors

关键的参数,是判断反应器是否适合反应体系的一个重要指标。图 4 中的灰色区域表示 CFD 模型中示踪剂加入的位置,位于预处理反应器的底部,与冷模实验中示踪剂“去离子水”的加入位点相同。

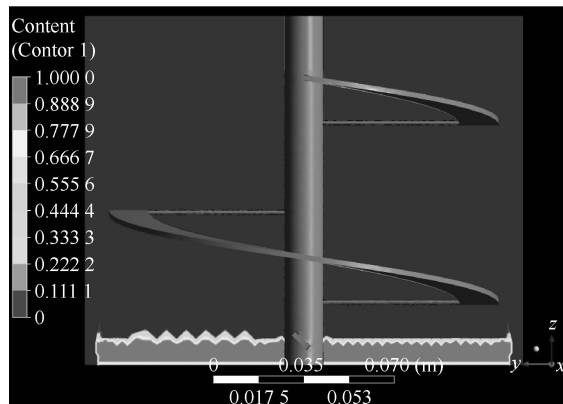


图 4 CFD 模拟中示踪剂的加入位点

Fig. 4 Tracer location in CFD simulation

图 5 对比了 CFD 模型计算所得示踪剂响应曲线与冷模试验中物料水含量的变化趋势。为了便于比较,示踪剂响应曲线和水含量变化曲线均经过归一化处理。分析图 5 可知,在 2~4 min 内,3 个不同尺度的预处理反应器中均达到了均匀的混合状态。而且,随着反应器直径的增大,混合时间有增加的趋势。此外计算流体力学模型与冷模实验所得混合时间的趋势吻合较好,尽管冷模试验物料水含量的变化趋势要略慢于 CFD 模型的模拟结果,这可能与冷模试验中取样时的搅拌停止有关。混合时间的对比结果表明,螺带型的搅拌桨可以快速、高效地实现固体质量分数高的玉米秸秆与水分的充分混合,而且计算流体力学模拟可以快速、简便地对高固体非牛顿体系进行模拟与预测。

尽管利用计算流体力学模型和冷模试验已经很好地验证了在干式稀酸预处理过程中加入螺带搅拌桨的可行性,但在 CFD 模型中有许多大胆的假设,如忽略重力影响,假设自由面为平面,实际上根据佛鲁特数( $Fr = dN^2/g$ )可计算得到,见表 5,随着转速和反应器直径的增加,佛鲁特数也逐渐增大,当佛鲁特数超过 0.1 时,这种假设就不太合适,应该考虑自由面上涡流的影响。因此在 CFD 的计算结果中,随着搅拌转速和反应器尺度的增加,功率的计算结果与冷模试验结果偏差变大。此外,冷模试验中的条件与实际预处理过程中的条件也差异较大,因此 CFD 和冷模的结果还需要实际的带有螺带搅拌的预处理反应器中实际预处理实验的验证,该工作目前正在进行中。

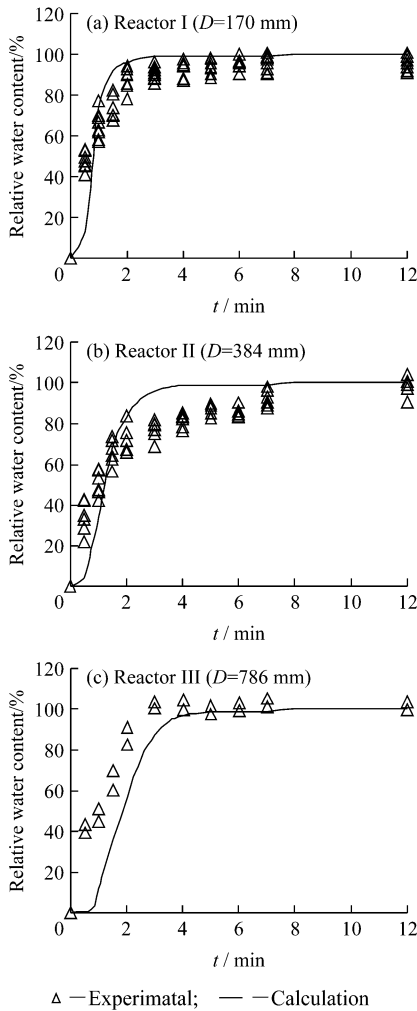


图 5 玉米秸秆 CFD 模拟示踪剂响应曲线与含水量相应曲线对比( $\omega_{H_2O} = 50\%$ )

Fig. 5 Comparison of mixing time between the CFD simulation model and the mock-up experiments in three different dimensional bioreactors (the rotation speed was 50 r/min and the final water content in the corn stover after mixing thoroughly was 50%)

表 5 不同转速下的佛鲁特(Rroude)准数<sup>1)</sup>

Table 5 Effect of rotation speed on the Rroude number<sup>1)</sup>

Rotation speed/ ( $r \cdot \min^{-1}$ )	$F_r$		
	5 L	100 L	500 L
50	0.011	0.011	0.050
60	0.016	0.035	0.072
70	0.021	0.048	0.098
80	0.028	0.063	0.128
90	0.035	0.079	0.162
100	0.043	0.098	0.200
110	0.052	0.119	0.243

1) The value of gravitational acceleration constant used in Rroude number calculation is 9.8 m/s<sup>2</sup>

螺带型搅拌桨可以处理固体含量高达 60%~70%的木质纤维素原料与液体或气体进行有效混合,而降低预处理过程的水用量和废水产生是预处理技术发展的趋势之一。在带有螺带搅拌的预处理反应器中进行高效的高固液比的预处理,可以有效降低预处理过程的水消耗和废水产生,促进预处理技术的工业化进程。此外,螺带型的搅拌方式也适合于其他主流的预处理方法,如稀碱预处理、蒸汽膨爆预处理等。

### 3 结 论

本文针对当前预处理过程因为无搅拌所导致的预处理物料不均匀、试验重复性差的缺陷,试图在干式稀酸预处理过程中引入螺带搅拌桨的混合形式。首先,结合木质纤维素吸水性强、流变学特性难以直接测定的特点,通过计算秸秆物系的表观黏度  $\eta_a$  和表观剪切速率  $\gamma_{eff}$ ,来获得表征秸秆物系流变特性的流变指数  $n$  和稠度系数  $K_{pl}$ ,从秸秆物系的流变指数和稠度系数可知该物系为剪切变稀的非牛顿流体物系。接着,通过计算流体力学软件建立了干式稀酸预处理过程的 CFD 模型,并用冷模试验的结果验证了所建立的 CFD 模型模拟结果的准确性。CFD 模拟和冷模试验的结果都表明了带有螺带型搅拌设计的可行性,从而为带有螺带型搅拌的螺带预处理反应器的设计提供了流体力学原理依据,为预处理反应器的放大提供了有力的工具。

#### 符号说明:

- $C$ ——表征搅拌桨特性的参数
- $d$ ——搅拌桨直径, m
- $D$ ——搅拌槽直径, m
- $d_e$ ——同轴圆柱等效直径, m
- $K_{pl}$ ——稠度系数,  $Pa \cdot s^n$
- $K_s$ —— Metzner 量纲为一的常数
- $l$ ——螺带搅拌桨浸入高度, m
- $M$ ——搅拌扭矩,  $N \cdot m$
- $M_1$ ——已知黏度或表观黏度的牛顿流体或非牛顿流体的扭转值,  $N \cdot m$
- $M_2$ ——冷模实验中不同实验条件下螺带搅拌桨的扭转值
- $n$ ——流变指数, 量纲为一
- $N$ ——搅拌转速, r/min
- $N_p$ ——功率准数, 量纲为一
- $N_r$ ——螺带桨的螺周数, 量纲为一
- $P$ ——搅拌槽功率消耗, W
- $Re_m$ ——搅拌雷诺数, 量纲为一
- $S$ ——螺带桨螺距, m

$S_e$ ——螺带桨直径比,量纲为一

$W$ ——螺带搅拌桨宽度, m

$\gamma_{\text{eff}}$ ——全部有效剪切速率,  $\text{s}^{-1}$

$\mu$ ——黏度,已知黏度的牛顿或非牛顿流体的黏度,  $\text{Pa} \cdot \text{s}$

$\eta_a$ ——表观黏度,  $\text{Pa} \cdot \text{s}$

$\rho$ ——密度,  $\text{kg}/\text{m}^3$

## 参考文献:

- [1] Galbe M, Zacchi G. Pretreatment of lignocellulosic materials for efficient bioethanol production [J]. *Advances in Biochemical Engineering/Biotechnology*, 2007, **108**:41-65.
- [2] Yang B, Wyman C. Pretreatment: The key to unlocking low-cost cellulosic ethanol[J]. *Biofuels Bioproducts and Biorefining*, 2008, **2**(1):26-40.
- [3] Zhang J, Wang X S, Chu D Q, *et al.* Dry pretreatment of lignocellulose with extremely low steam and water usage for bioethanol production [J]. *Bioresource Technology*, 2011, **102**(6): 4480-4488.
- [4] 张建, 楚得强, 于占春, 等. 低水用量约束下的高固体含量纤维乙醇生物加工技术策略[J]. *生物工程学报*, 2010, **26**(7): 950-959.
- [5] Humbird D, Davis R, Tao L, *et al.* Process design and economics for biochemical conversion of lignocellulosic biomass to ethanol; Dilute-acid pretreatment and enzymatic hydrolysis of corn stover [R]. Golden CO: National Renewable Energy Laboratory (NREL), 2011.
- [6] Aden A, Ruth M, Ibsen K, *et al.* Lignocellulosic biomass to ethanol process design and economics utilizing co-current dilute acid prehydrolysis and enzymatic hydrolysis for corn stover [R]. Golden CO: National Renewable Energy Laboratory (NREL), 2002.
- [7] Zhang J, Chu D Q, Huang J, *et al.* Simultaneous saccharification and ethanol fermentation at high corn stover solids loading in a helical stirring bioreactor[J]. *Biotechnology and Bioengineering*, 2010, **105**(4): 718-728.
- [8] Viamajala K, Mcmillan J, Schell D, *et al.* Rheology of corn stover slurries at high solids concentrations; Effects of saccharification and particle size[J]. *Bioresource Technology*, 2009, **100**(2): 925-934.
- [9] Kembrowski Z, Kristiansen B. Rheometry of fermentation liquids[J]. *Biotechnology and Bioengineering*, 1986, **28**(10): 1474-1483.
- [10] Pimenova N, Hanley T. Measurement of rheological properties of corn stover suspensions [J]. *Applied Biochemistry and Biotechnology*, 2003, **106**(1-3): 383-392.
- [11] Pimenova N, Hanley T. Effect of corn stover concentration on rheological characteristics [J]. *Applied Biochemistry and Biotechnology*, 2004, **114**(1-3): 347-360.
- [12] Knutsen J, Liberatore M. Rheology of high-solids biomass slurries for biorefinery applications [J]. *Journal of Rheology*, 2009, **53**(4): 877-893.
- [13] Powell R. Rheology of suspensions of rodlike particles [J]. *Journal of Statistical Physics*, 1991, **62**(5-6): 1073-1094.
- [14] Stickel J, Powell R. Fluid mechanics and rheology of dense suspensions [J]. *Annual Review of Fluid Mechanics*, 2005, **37**: 129-149.
- [15] Nguyen Q, Boger D. Measuring the flow properties of yield stress fluids [J]. *Annual Review of Fluid Mechanics*, 1992, **24**: 47-88.
- [16] Wiman M, Palmqvist B, Tornberg E, *et al.* Rheological characterization of dilute acid pretreated softwood [J]. *Biotechnology and Bioengineering*, 2011, **108**(5): 1031-1041.
- [17] Metzner A B, Otto R E. Agitation of non-newtonian fluids [J]. *AIChE Journal*, 1957, **3**(1): 3-10.
- [18] Delaplace G, Guerin R, Leuliet J, *et al.* An analytical model for the prediction of power consumption for shear-thinning fluids with helical ribbon and helical screw ribbon impellers [J]. *Chemical Engineering Science*, 2006, **61**(10): 3250-3259.
- [19] 钟丽, 英雄斌, 贾志刚. 用CFD研究搅拌器的功率曲线 [J]. *北京化工大学学报:自然科学版*, 2003, **30**(5):4-8.

欢迎订阅

《华东理工大学学报(自然科学版)》

地址:上海市梅陇路130号436信箱 邮编:200237

邮发代号:4-382