



بررسی مدل‌های احتراقی در شبیه‌سازی عددی کوره دوار سیمان

حبیب اله فاتح نوبندگانی¹، کیومرث مظاهری^{2*}

1- کارشناس ارشد، مهندسی مکانیک، دانشگاه تربیت مدرس، تهران

2- استاد، مهندسی مکانیک، دانشگاه تربیت مدرس، تهران

* تهران، صندوق پستی 111-14115، kiumars@modares.ac.ir

اطلاعات مقاله

مقاله پژوهشی کامل

دریافت: 17 فروردین 1394

پذیرش: 17 اردیبهشت 1394

ارائه در سایت: 10 خرداد 1394

کلید واژگان:

کوره دوار سیمان

دینامیک سیالات محاسباتی

مدل‌های احتراقی

چکیده

کوره‌های دوار سیمان به طور گسترده برای تبدیل مواد خام به کلینکر مورد استفاده قرار می‌گیرند. کارکرد این کوره فرآیندی پیچیده و شامل پدیده‌های گوناگونی است که مهمترین آن‌ها جریان واکنشی مواد بستر، احتراق آشفته سوخت گازی و تشعشع در یک بدنه دوار و اندرکنش حرارتی و جرمی بین بخش‌های مذکور هستند. در کار حاضر با استفاده از دینامیک سیالات محاسباتی، یک مدل عددی برای این کوره ارائه شده است که در آن سه ناحیه احتراق، واکنش مواد بستر و بدنه کوره لحاظ شده است. با شبیه‌سازی دوبعدی متقارن محوری این کوره با استفاده از این مدل، مدل‌های احتراقی واکنشگاه نیمه مخلوط، اتلاف گردابه و مدل کسر مخلوط در کوره‌های دوار سیمان، با استفاده از یک شبکه محاسبات موازی مورد مطالعه قرار گرفت. با توجه به محدوده زیاد عدد دامکولر در میدان کوره ($0.7 < Da < 17$) انتخاب مدل احتراقی مناسب دشوار می‌باشد. نتایج نشان دادند که از لحاظ زمان اجراء، مدل واکنشگاه نیمه مخلوط زمان‌برترین و مدل کسر مخلوط سریع‌ترین مدل می‌باشند، در حالی که هر دو مدل فیزیک جریان را نیز به خوبی پیش‌بینی می‌کنند. از جنبه‌ای دیگر نتایج مربوط به کسر مولی گونه CO_2 نشان دادند که در محاسبه مقادیر گونه‌ها، مدل‌های احتراقی مانند واکنشگاه نیمه مخلوط که در آن‌ها واکنش‌های شیمیایی در محاسبه نرخ احتراق لحاظ می‌شوند و معادلات بقای گونه‌ها برای هر گونه حل می‌شوند، دقت بالاتری دارند.

Investigation of Combustion Models in Numerical Simulation of Cement Rotary Kiln

Habibollah Fateh Nobandegani¹, Kiumars Mazaheri^{2*}

Department of Mechanical Engineering, Tarbiat Modares University, Tehran, Iran.

* P.O.B. 14115-143 Tehran, Iran, kiumars@modares.ac.ir

ARTICLE INFORMATION

Original Research Paper
Received 06 April 2015
Accepted 07 May 2015
Available Online 31 May 2015

Keywords:

Cement Rotary Kiln
CFD
Combustion Models

ABSTRACT

Cement rotary kilns are extensively used to change raw material into clinker. This is a complex process and consists of many different phenomena such as bed material reactions, gas phase turbulent combustion and radiation in a rotary drum, and thermal-mass interactions between them. Using CFD, the two-dimensional numerical simulation of cement rotary kiln was performed in the present study. This model included gaseous fuel combustion, bed material reactions, and radiation heat transfer in the kiln. Using this model and parallel processing network, combustion models (PaSR, EDM and mixture fraction) in the cement kilns are investigated. Due to the high Damkohler number in the cement kiln ($0.7 < Da < 17$), selecting the appropriate combustion model is difficult. Among the combustion models that were studied, it was found that the PaSR model is the slowest and mixture fraction model is the fastest model, whereas both models predict physics well. On the other hand, results of CO_2 mole fraction showed that to determine species mole fraction, using combustion models that include chemical reactions in calculating combustion rate and solve species conservation equation for each species (such as PaSR model) are more accurate.

1- مقدمه

انرژی مورد استفاده در صنایع یک کشور را به خود اختصاص داده است [2]. اهمیت توزیع درجه حرارت درون کوره، مصرف سوخت، انتقال حرارت در فرآیندهای مختلف درون کوره، اتلافات حرارتی از کوره، تولید گاز گلخانه‌ای CO_2 اهمیت مدل‌سازی این نوع کوره‌ها را برای بررسی پارامترهای تأثیرگذار نشان می‌دهند.

کوره دوار سیمان شامل فرآیندهای پیچیده‌ای از قبیل احتراق، انتقال حرارت بین مواد بستر، جریان گاز و دیواره، واکنش مواد بستر و چرخش

کوره‌های دوار از نوع کوره‌های احتراقی می‌باشند که از آن‌ها در صنایع مختلف استفاده می‌شود. با توجه به ظرفیت و انتقال حرارت بالا در کوره‌های دوار، از این کوره‌ها در صنعت سیمان به‌طور گسترده برای تبدیل مواد خام به کلینکر استفاده می‌شود. کوره‌های دوار سیمان در راندمان حرارتی پایین، در حدود 20 الی 50 درصد، کار می‌کنند [1]. این کوره‌ها در صنعت سیمان رتبه اول مصرف انرژی را در بین صنایع داراست و در حدود 12 الی 15 درصد کل

Please cite this article using:

H. Fateh Nobandegani, K. Mazaheri, Investigation of Combustion Models in Numerical Simulation of Cement Rotary Kiln, *Modares Mechanical Engineering*, Vol. 15, No. 7, pp. 199-208, 2015 (In Persian)

برای ارجاع به این مقاله از عبارت ذیل استفاده نمایید:

می‌باشد. این فرآیندها با هم کوپل هستند و شبیه‌سازی عددی کوره دوار سیمان را دشوار می‌کنند. بنابراین هدف از شبیه‌سازی عددی دستیابی به مدلی جامع و در عین حال ساده، برای بررسی شرایط کارکرد کوره و فرآیندهای درون آن می‌باشد.

نخستین شبیه‌سازی‌های انجام شده برای کوره‌های دوار، از جمله کوره‌های دوار سیمان، مبتنی بر ساده‌سازی‌های بسیار برای استخراج مدل‌های ریاضی بوده است که نتایج کلی و مهمی را به دست می‌دهد. بلومبرگ [3] در رساله دکترای خود اولین مدل‌سازی کوره دوار سیمان به صورت یک‌بعدی، به منظور بررسی و کنترل فرآیند درون کوره را انجام داد. بلومبرگ با ارائه مدل منطقه‌ای¹ خود محدوده‌های دمایی جریان گاز و مواد بستر درون کوره را مشخص کرد و بیشینه دمایی درون کوره را 2370 کلوین به دست آورد. اسپنگ [4] یک مدل دینامیکی یک‌بعدی برای کوره‌های دوار سیمان ارائه کرد. در این مدل دینامیکی معادلات دیفرانسیل در حالت ناپایا برای کل میدان کوره در راستای طول نوشته شدند. اسپنگ با اعمال این مدل برای یک کوره دوار سیمان به طول 120 متر، پروفیل دمایی جریان گاز، بستر مواد جامد، بدنه کوره و همچنین تغییرات مقادیر گونه‌های مواد بستر به جز گونه CO₂ در راستای طول کوره را به دست آورد. دمایی بیشینه درون کوره توسط اسپنگ 2600 کلوین به دست آمد که با واقعیت موجود تطابق خوبی نداشت. در این کار جزئیاتی در مورد شعله، منطقه تشکیل و شرایط آن بررسی نشده بود. جورج و همکارانش [5] انتقال حرارت از شعله درون کوره را با استفاده از مدل منطقه‌ای بلومبرگ و ارائه مدلی برای حرارت شعله که به نوع سوخت، دمایی هوای ثانویه، مقدار هوای اولیه و هوای اضافی و دبی جریان سوخت بستگی دارد، بررسی کردند. نتایج نشان دادند که افزایش دمایی هوای ثانویه باعث افزایش طول شعله می‌شود ولی تأثیر کمی بر دمایی بیشینه جریان می‌گذارد. همچنین افزایش درصد هوای اولیه باعث کاهش طول شعله و افزایش دمایی بیشینه شعله می‌شود که باعث کاهش مقدار حرارت انتقالی به مواد بستر در منطقه تشکیل شعله می‌شود. بار و همکارانش [6] با ارائه مدل ریاضی، تأثیر مستقیم دمایی کارکرد کوره را بر انتقال حرارت تشعشعی درون کوره بررسی کردند و نشان دادند که با افزایش دمایی کوره از 1000 کلوین به 1800 کلوین، سهم انتقال حرارت تشعشعی دو برابر می‌شود. ایشان همچنین نشان دادند افزایش یک مرتبه بزرگی قطر کوره، باعث سه برابر شدن نرخ انتقال حرارت تشعشعی در کوره می‌شود. بوئینگ و بار [7] مدل ترکیبی 1 بعدی و 2 بعدی به ترتیب برای جریان‌های داغ و جریان مواد بستر کوره دوار سیمان ارائه دادند. در این کار مدلی جامع برای انتقال حرارت مواد بستر در حین چرخش ارائه شد و در آن اندرکنش حرارتی بین جریان گاز، مواد بستر و دیواره کوره لحاظ شد. نتایج نشان دادند با افزایش دوران از 1/5 به 3 دور بر دقیقه اختلاف دمایی سطح مواد بستر با لایه‌های زیرین از 303 کلوین به 285 کلوین می‌رسد و با افزایش دوران به 5 دور بر دقیقه لایه‌های مواد بستر تقریباً هم‌دما می‌شوند. ماستراکس و همکارانش [8] اولین مدل دینامیک سیالات محاسباتی را برای کوره دوار سیمان ارائه دادند. در این کار آن‌ها برای هندسه متقارن محوری، مدل سه‌بعدی جریان گاز شامل روش مونت-کارلو² برای تشعشع با مدل‌های یک‌بعدی دیواره و واکنش‌های مواد بستر را کوپل کردند. نتایج نشان دادند که سهم غالب انتقال حرارت از جریان گاز به دیواره کوره از طریق تشعشع می‌باشد. اتلاف حرارت از دیواره کوره به محیط تقریباً 10 درصد حرارت کل می‌باشد و همچنین بیش از 40 درصد آن

صرف واکنش‌های مواد بستر و تشکیل کلینکر می‌شود. لقمانی و همکارانش [9] شبیه‌سازی یک‌بعدی قابل‌قبولی بر اساس مدل اسپنگ ارائه دادند. در این مدل ضعف مدل اسپنگ در محاسبه دمایی بیشینه جریان گاز درون کوره با استفاده از رابطه ارائه شده توسط جورج و همکارانش برای محاسبه گرمای احتراق تا حدودی برطرف شد. در این مدل پروفیل دمایی جریان گاز، بستر مواد جامد، بدنه کوره و همچنین تغییرات مقادیر گونه‌های مواد بستر در راستای طول کوره محاسبه شد. ماجومدار و رانده [10] یک مدل یک‌بعدی ترمودینامیکی با اعمال مدلی برای ارتفاع بستر برای بررسی فرآیندهای شکل‌گرفته در مواد بستر کوره ارائه دادند. در این مدل ارتفاع مواد بستر در راستای طول کوره تابعی از چرخش، زاویه مواد بستر، شیب کوره و شعاع بدنه کوره در مقاطع مختلف بود. نتایج نشان دادند که کوره در سرعت دورانی پایین در حدود 2 الی 4 دور بر دقیقه، و نرخ بالاتر مواد خام ورودی، مصرف انرژی کمتری دارد. همچنین با نزدیک‌تر شدن محل دمایی بیشینه شعله (یا جریان گاز) در حدود 0/4 متر به محل ورود مواد خام، مصرف انرژی کوره سیمان 14% کاهش می‌یابد. دارابی [11] در رساله دکترای خود یک کوره دوار سیمان در مقیاس واقعی، در حالت پایا و شرایط واقعی کارکرد، با استفاده از دینامیک سیالات محاسباتی شبیه‌سازی کرد. فرضیات اصلی و مدل‌های به کار گرفته شده در این تحقیق عبارت بودند از تراکم‌ناپذیری، مدل اغتشاشی کی-پسیلون³، دیواره چندلایه‌ای کوره و صرف‌نظر از انتقال حرارت هدایتی. در این مدل معادلات واکنش مواد بستر مطابق مدل یک‌بعدی اسپنگ اضافه شده است. همچنین در این مدل اثر شناوری لحاظ شده است. نتایج نشان دادند که 20% انرژی کل صرف واکنش مواد بستر، 4% تلفات از دیواره بدنه و تقریباً 50% انرژی کل توسط محصولات احتراق خارج می‌شود. همچنین تقریباً 25% انرژی کل توسط کلینکر تولید شده از کوره خارج می‌شود. همچنین در این تحقیق به کارگیری سوخت جایگزین، تأثیر بررسی شد. نتایج نشان دادند که با به کارگیری تأثیر به‌عنوان سوخت جایگزین، به دلیل کاهش دمایی بیشینه شعله تولید NO تقریباً 30% کاهش یافته است. با توجه به استفاده از مدل یک‌بعدی جریان مواد بستر، امکان تحلیل حرارتی و هیدرودینامیکی جریان مواد بستر در این مدل وجود ندارد. از آخرین کارهای انجام شده در زمینه مدل‌سازی کوره دوار سیمان، کار گروه تحقیقاتی پیزارونی و همکارانش [12,13,14] می‌باشد. در این کار مدل‌سازی احتراق و انتقال حرارت در جریان گاز و دیواره و همچنین تحلیل حرارتی و هیدرودینامیکی مواد دانه‌ای بستر به صورت سه‌بعدی انجام شد. مدل‌ها و فرضیات به کار گرفته شده در این شبیه‌سازی عبارت بودند از مدل اغتشاشی کی-پسیلون ریلایزبل⁴ به دلیل محاسبه دقیق‌تر ترم اتلاف نسبت به مدل کی-پسیلون، مدل تشعشعی محیط مجزا⁵ با توجه به وجود مواد با جنس مختلف در کوره، مدل احتراقی شکست گردابه⁶ برای احتراق گاز طبیعی با هوا، لحاظ نکردن مدل تولید یا مصرف گونه‌های مواد بستر، استفاده از فرض گاز کامل برای توصیف تغییرات چگالی با دما و در نظر گرفتن مکانیزم زلدوویچ⁷ برای بررسی تولید NO_x. نتایج نشان دادند که تشکیل رسوب مواد بستر به دلیل تولید کلینکر مذاب در منطقه‌ای که حرارت بیشینه تشعشعی از شعله به مواد بستر انتقال می‌یابد، رخ می‌دهد. با توجه به اینکه در کار پیزارونی و همکارانش بخش‌های مختلف کوره دوار سیمان در سه بعد

3- k-ε

4- k-ε Realizable

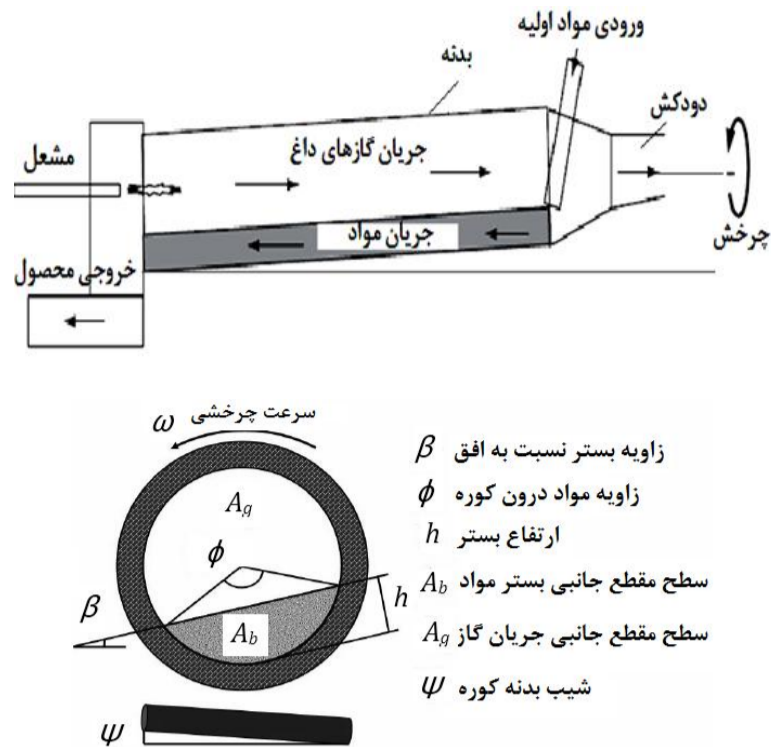
4- Participating Media

6- Eddy Break-Up (EBU) Model

7- Zeldovich mechanism

1- Zone method

2- Monte Carlo



شکل 1 طرحواره کوره دوار سیمان و فرآیندهای درون آن (شکل بالا)، طرحواره سطح مقطع کوره دوار سیمان (شکل پایین)

در این حلگر تشعشع در نظر گرفته نمی‌شود به همین دلیل در تحقیق حاضر با اضافه کردن ترم چشمه برای تشعشع سعی شده است مدل تشعشعی به این حلگر اضافه شود. همچنین برای حل واکنش‌های مواد بستر با اعمال تغییراتی در قسمت واکنشی حلگر این امکان نیز به حلگر اضافه شده است. بنابراین حلگر ریآکتینگ فوم به حلگر ریآکتینگ فوم تشعشعی⁶ که در آن تشعشع و حل واکنش‌های مواد بستر نیز لحاظ شده، توسعه داده شده است.

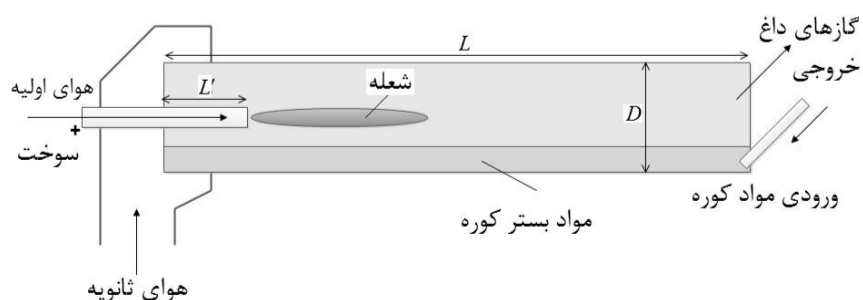
3-1-1-3 معادلات حاکم و شرایط مرزی

در مدل ارائه شده با توجه به پدیده‌هایی که در هر ناحیه کوره رخ می‌دهد، معادلات حاکم به صورت مجزا به این ناحیه‌ها اعمال و با در نظر گرفتن انتقال حرارت بین نواحی، حل می‌شود. در ادامه معادلات حاکم و شرایط مرزی هر یک از ناحیه‌های محاسباتی توضیح داده شده است.

3-1-1-3 ناحیه احتراق

ناحیه احتراق، محل آزاد شدن حرارت حاصل احتراق گاز طبیعی و هوا می‌باشد. در کار حاضر گاز طبیعی با متان تخمین زده شده است. همانند بسیاری از کاربردهای صنعتی دیگر، احتراق در کوره دوار سیمان به صورت غیرپیش‌آمیخته و مغشوش است.

معادلات حاکم بر ناحیه احتراق شامل معادله بقای جرم، معادلات بقای تکانه خطی، معادله بقای انرژی و معادلات بقای گونه‌ها به همراه معادله حالت می‌باشند. شکل متوسط‌گیری شده این معادلات به صورت زیر می‌باشند (علامت "-" نشان‌دهنده متوسط‌گیری زمانی و "-" نشان‌دهنده متوسط‌گیری جرمی می‌باشند) [18]:



شکل 2 طرحواره نواحی درون کوره دوار سیمان

شبیه‌سازی شده است ولی به دلیل هزینه‌ی زیاد محاسباتی مدل‌های احتراق، تشعشعی و توربولانسی و شرایط مختلف آن‌ها مورد بررسی قرار نگرفته است. کشاورز و همکارانش [15] تحلیل موازنه جرم، انرژی و چگونگی توزیع انرژی‌های ورودی و خروجی دیارتمان پخت در صنعت سیمان را با استفاده از اندازه‌گیری داده‌ها برای کوره دوار سیمان شرکت فارس نو انجام دادند. آن‌ها به دست آوردند که تقریباً 11/4% انرژی حرارتی از بدنه تجهیزات، 27/45% همراه گازهای خروجی و 5/85% همراه کلینکر از کوره خارج می‌شوند و تقریباً 54/15% جهت پخت کلینکر مورد استفاده قرار می‌گیرد. همچنین مشخص گردید که 59/6% از خوراک کوره به کلینکر، 33/34% به دی‌اکسید کربن ناشی از کلسیناسیون و 2/06% به بخار آب تبدیل می‌شود.

در پژوهش حاضر کوره دوار سیمان شرکت فارس نو [15] به صورت عددی شبیه‌سازی شده و علاوه بر فرآیند احتراق و انتقال حرارت تشعشع درون میدان کوره، واکنش مواد بستر درون کوره نیز لحاظ شده است. هدف، بررسی مدل‌های احتراقی در شبیه‌سازی عددی کوره دوار سیمان و همچنین بررسی نقش تعداد پردازنده در پردازش موازی می‌باشد. برای مدل‌سازی از نرم‌افزار متن‌باز آپن‌فوم¹، نسخه 2.0.1 استفاده شده است. برای مدل‌سازی از حلگر جریان‌های واکنشی، ریآکتینگ فوم²، استفاده می‌شود. از آنجا که در حلگر واکنشی ریآکتینگ فوم تشعشع و همچنین مدلی برای واکنش‌های درون مواد بستر لحاظ نشده است، معادلات و عبارات لازم برای لحاظ کردن تشعشع و همچنین واکنش مواد بستر توسط کاربر به حلگر افزوده شده است.

2- معرفی کوره دوار سیمان

کوره دوار سیمان به طور کلی شامل یک بدنه استوانه‌ای شکل بوده که تحت زاویه‌ای خاص (3 الی 4 درجه) نسبت به افق قرار می‌گیرد. مواد ورودی به کوره دوار سیمان شامل کلسیم کربنات (CaCO₃)، سیلیکا (SiO₂)، اکسید آلومینیوم (Al₂O₃)، اکسید آهن (Fe₂O₃) و آب می‌باشد. این مواد به صورت مخلوط وارد کوره می‌شوند [16]. این مواد تحت زاویه خاص با توجه به شیب و چرخش کوره در بستر کوره قرار می‌گیرند. با ورود مواد اولیه به کوره، گازهای داغ تولید شده توسط مشعل در خلاف جهت حرکت مواد درون کوره به سمت مواد سوق داده می‌شوند (شکل 1). با توجه به مناطق دمایی درون کوره و انتقال حرارت بین بخش‌های مختلف واکنش درون مواد بستر در سه منطقه واکنشی پیش‌گرمایش³، کلسینه شدن⁴ و منطقه حرارت‌دهی یا پخت⁵ انجام می‌گیرد [17]. بر این اساس پدیده‌های فیزیکی-شیمیایی که درون کوره رخ می‌دهند شامل فرآیند احتراق سوخت در فاز گازی و واکنش‌های شیمیایی مواد بستر (در فاز جامد) با توجه به انتقال حرارت (هدایت، جابجایی و تشعشع) بین فاز جامد، فاز گازی و دیواره چرخان کوره می‌باشد [11].

3- شبیه‌سازی کوره دوار سیمان

کوره دوار سیمان شامل فرآیندهای پیچیده‌ای از قبیل احتراق، انتقال حرارت بین مواد بستر، جریان گاز و دیواره و واکنش مواد بستر می‌باشد. در کار حاضر، با توجه به پدیده‌های موجود، برای مدل‌سازی، کوره دوار سیمان به سه ناحیه مجزا تقسیم می‌شود. این نواحی عبارتند از ناحیه احتراق، ناحیه واکنشی مواد بستر و بدنه کوره (شکل 2). برای مدل‌سازی احتراق غیرپیش‌آمیخته از حلگر جریان‌های واکنشی، ریآکتینگ فوم، استفاده می‌شود.

- 1- OpenFOAM
- 2- reactingFOAM
- 3- Preheat zone
- 4- Calcining zone
- 5- Burning zone

6- RadiationreactingFOAM

- بقای جرم:

$$\frac{\partial \bar{\rho}}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_i} (\bar{\rho} \bar{u}_i) = 0 \quad (1)$$

- بقای تکانه خطی:

$$\frac{\partial (\bar{\rho} \bar{u}_i)}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_i} (\bar{\rho} \bar{u}_i \bar{u}_j) = -\frac{\partial \bar{p}}{\partial x_j} + \frac{\partial}{\partial x_i} (\bar{\tau}_{ij} - \bar{\rho} \bar{u}_i'' \bar{u}_j'') \quad (2)$$

- بقای انرژی:

$$\frac{\partial (\bar{\rho} \bar{h}_s)}{\partial t} + \frac{\partial (\bar{\rho} \bar{u}_i \bar{h}_s)}{\partial x_i} = \bar{\omega}_T + \frac{D\bar{p}}{Dt} + \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\lambda \frac{\partial T}{\partial x_i} - \overline{\rho u_i'' h_s''} \right) + \tau_{ij} \frac{\partial u_i}{\partial x_j} - \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\rho \sum_{k=1}^N V_{k,i} Y_k h_k \right) + Sh \quad (3)$$

که در آن

$$\frac{D\bar{p}}{Dt} = \frac{\partial \bar{p}}{\partial t} + \bar{u}_i \frac{\partial \bar{p}}{\partial x_i} + \bar{u}_i'' \frac{\partial \bar{p}}{\partial x_i} \quad (4)$$

- بقای گونه:

$$\frac{\partial (\bar{\rho} \bar{Y}_k)}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_i} (\bar{\rho} \bar{u}_i \bar{Y}_k) = -\frac{\partial}{\partial x_i} \left[\rho D_k \frac{\partial Y_k}{\partial x_i} + \overline{\rho u_i'' Y_k''} \right] + \bar{\omega}_k \quad (5)$$

در روابط (1) تا (5)، u مولفه سرعت، u'' نوسانات سرعت، p فشار، i, j, k تانسور تنش، Y_k کسر جرمی گونه k ام، D_k ضریب نفوذ گونه k ام، h_s آنتالپی محسوس، T دما، λ ضریب نفوذ حرارتی، Sh جمله چشمه تشعشع و V_k سرعت نفوذ گونه k ام هستند. همچنین در این معادلات عبارتهای مجهولی وجود دارند که نیازمند مدل کردن هستند، تا در انتها دستگاه معادلات بسته شود. این عبارتهای شامل تنشهای رینولدزی $\overline{\rho u_i'' u_j''}$ ، شار اغتشاشی کسر جرمی گونه k ام $\overline{\rho u_i'' Y_k''}$ ، نرخ شار گرمایی اغتشاشی $\overline{\rho u_i'' h_s''}$ ، تولید حرارت لزجی $\tau_{ij} \frac{\partial u_i}{\partial x_j}$ ، شار نفوذی مولکولی حرارتی $\lambda \frac{\partial T}{\partial x_i}$ و گونهها $\rho D_k \frac{\partial Y_k}{\partial x_i}$ ، نرخ تولید گونه k ام، $\bar{\omega}_k$ و نرخ حرارت آزاد شده ناشی از احتراق، $\bar{\omega}_T$ می‌باشند.

3-1-1-1-1-1 مدل اغتشاشی

برای شبیه‌سازی اغتشاش جریان از مدل دو معادله‌ای کی-پسیلون استاندارد استفاده شده است. در این مدل برای هر یک از متغیرهای انرژی جنبشی اغتشاشی k^2 و نرخ اتلاف اغتشاشی ϵ^3 ، یک معادله انتقال حل می‌کند و لزجت اغتشاشی را به وسیله آن دو متغیر طبق مدل بوزینسک تخمین می‌زند [18]. پایین بودن دقت، بالابودن اتلاف در جریانهای برگشتی یا جریانهای دارای انحنا و عدم توانایی پیش‌بینی بیشینه انرژی جنبشی اغتشاشی در نزدیکی سطح جامد از جمله مشکلات مدل کی-پسیلون می‌باشد اما با توجه به رینولدز بالای جریان درون کوره و مقطع دایروی کوره و همچنین سرعت مناسب مدل کی-پسیلون در محل مناسب، در تحقیق حاضر از مدل اغتشاشی دو معادله‌ای کی-پسیلون استفاده می‌شود [19].

3-2-1-1-1-3 مدل تشعشعی

هدف از حل معادله انتقال مربوط به تشعشع، محاسبه جمله چشمه تشعشع در معادله بقای انرژی و تعیین شار حرارت تشعشعی روی مرزها می‌باشد [20]. با توجه به اینکه حلگر ریآکتینگ فوم تشعشع را حل نمی‌کند، این قابلیت با

اضافه کردن جمله چشمه تشعشع به معادله بقای انرژی طبق رابطه (6) انجام شده است [21]:

$$Sh() = R_u() - 4R_p() \times \frac{T^3 h}{C_p} - R_p() T^4 + 4R_p() \times \frac{T^3 h}{C_p} \quad (6)$$

که در آن h ، آنتالپی، T دما و C_p ظرفیت گرمایی در فشار ثابت می‌باشد. همچنین $R_u()$ و $R_p()$ توابعی هستند که با توجه به مدل تشعشعی مورد استفاده در حلگر تعریف می‌شوند [22]. در نرم‌افزار متن‌باز آپن‌فوم امکان استفاده از مدل‌های P-1 و جهات گسسته⁴ برای تشعشع وجود دارد. با توجه به قابلیت خوب مدل جهات گسسته در اعمال بر محفظه‌های احتراق با هندسه‌های پیچیده و بزرگ، عدم حساسیت این مدل به ضخامت نوری و تنظیماتی که برای تعیین دقت مورد نیاز کاربر فراهم می‌کند و همچنین تطابق مناسب بین سرعت و دقت محاسبات [23,24] در تحقیق حاضر از این مدل با 16 پرتو استفاده می‌شود. همچنین به دلیل وجود گونه‌های CO_2 و H_2O در محصولات احتراق، از مدل گاز خاکستری برای لحاظ کردن رفتار تشعشعی گازهای موجود در ناحیه احتراق استفاده شده است [20].

3-1-1-1-3 مدل احتراقی

مدل احتراقی برای بیان نرخ واکنش متوسط‌گیری شده و روابطی برای تعیین شارهای گونه‌های شیمیایی و آنتالپی (شارهای رینولدزی)، می‌باشد [18]. در مدل‌سازی احتراق غیر پیش‌آمیخته آشفته می‌توان از مدل کسر مخلوط⁵ استفاده کرد. در این مدل، با تعریف پارامتر کسر مخلوط به صورت نسبت جرم مواد موجود در سوخت به جرم مخلوط، f ، معادلات انتقال بر پایه این پارامتر نوشته می‌شوند. سپس بر اساس محاسبات تعادلی و تابع احتمال چگالی⁶ مقادیر گونه‌ها، نرخ احتراق و دما محاسبه می‌شوند [25]. همچنین از مدل‌های شکست گردابه⁷، اتلاف گردابه⁸، مفهوم اتلاف گردابه⁹ و واکنشگاه نیمه مخلوط، برای محاسبه نرخ احتراق می‌توان استفاده نمود. در مدل شکست گردابه که توسط اسپالدینگ مطرح شد، فرض می‌شود که نرخ واکنش وابسته به نرخ شکست گردابه‌ها توسط حرکت‌های آشفته می‌باشد [26]. این مدل نرخ واکنش را بیشتر از واقعیت تخمین می‌زند؛ به ویژه در نواحی‌ای با تغییرات زیاد، جایکه ϵ/k مقدارش زیاد است (مثلاً در دنباله شعله و کنار دیواره‌ها) [18]. مگنسن و هجرتاگر به منظور بهبود عملکرد مدل شکست گردابه و همچنین توسعه کاربرد آن برای جریانهای احتراقی غیر پیش‌آمیخته، مدل اتلاف گردابه، به عنوان ویرایش جدیدی از مدل شکست گردابه را ارائه دادند [27]. در این مدل نرخ واکنش مستقیماً به زمان مشخصه اختلاط مولکولی مربوط بوده و در جریان‌های واکنشی مغشوش به صورت ضریبی از نسبت نرخ اتلاف انرژی اغتشاشی، ϵ ، به انرژی جنبشی اغتشاشی، k ، تعریف می‌شود. این مدل تنها به غلظت متوسط گونه‌ها و میزان آشفستگی جریان وابسته است؛ بنابراین اگر در نواحی‌ای از میدان غلظت گونه‌ها و شدت آشفستگی یکسان باشد اما دماهای متفاوتی وجود داشته باشد، نرخ واکنش یکسان پیش‌بینی می‌شود [18]. در ادامه مدل مفهوم اتلاف گردابه به منظور در نظر گرفتن واکنش‌های شیمیایی در مدل‌سازی احتراق آشفته توسط مگنسن ارائه شد [28]. در این مدل هم تأثیر اختلاط مولکولی و هم تأثیر واکنش‌های شیمیایی بر روی نرخ احتراق دیده شده است. مدل

4- Discrete Ordinates (DO)
5- Mixture Fraction
6- Probability Density Function (PDF)
7- Eddy Break-up model (EBU)
8- Eddy Dissipation model (EDM)
9- Eddy Dissipation Concept (EDC)

1- Viscous heating
2- Turbulence kinetic energy
3- Turbulence Dissipation Rate

که در آن E_i و A_i به ترتیب ضریب نرخ واکنش و انرژی فعال‌سازی گونه-ها و T_s دمای مواد جامد می‌باشد.

3-2- روش حل عددی

در کار حاضر، شبیه‌سازی عددی کوره دوار سیمان در مقیاس واقعی به صورت دو بعدی و با استفاده از حلگر اصلاح‌شده ری‌آکتینگ‌فوم تشعشعی صورت پذیرفته است. این حلگر بر پایه حلگر ری‌آکتینگ‌فوم موجود در نرم‌افزار متن‌باز آپن‌فوم نوشته شده است. حلگر ری‌آکتینگ‌فوم قابلیت شبیه‌سازی احتراق غیرپیش‌آمیخته آشفته با استفاده از مدل احتراقی واکنشگاه نیمه مخلوط و بدون در نظر گرفتن تشعشع را دارا می‌باشد [22]. در این حلگر، حل انتقال حرارت تشعشعی با استفاده از زبان برنامه‌نویسی شی‌گرا اصلاح گردیده است. همچنین با ساختن کتابخانه‌ای به نام شیمی و اضافه نمودن آن به کتابخانه‌های آپن‌فوم، قابلیت حل معادله بقای گونه مواد بستر در راستای طول نیز به حلگر افزوده شده است. در این حلگر تصحیح فشار با الگوریتم پیمپل⁸ انجام می‌شود. این الگوریتم با توجه به دو روش سیمپل⁹ و پیرو¹⁰ تصحیح سرعت و فشار توسعه داده شده است. در روش سیمپل فشار یک‌بار پیش‌بینی و تصحیح می‌گردد، در حالی که در روش پیرو فشار یک‌بار پیش‌بینی و دو بار تصحیح می‌گردد و دقت بیشتری دارد [24]. همچنین از روش‌های گسسته‌سازی مختلفی در این مدل‌سازی استفاده شده است. برای گسسته‌سازی کلیه ترم‌های زمانی از روش اولر مرتبه یک و برای گسسته‌سازی مکانی سایر پارامترها از روش‌های با دقت مرتبه دو استفاده شده است. همچنین کلیه میان‌یابی‌های انجام گرفته به صورت خطی می‌باشد.

4- نتایج و بحث

در تحقیق حاضر، کوره دوار سیمان شرکت سیمان فارس نو در استان فارس مبنای مطالعه و مدل‌سازی قرار گرفته است. کوره مورد نظر، دارای بدنه‌ای به قطر داخلی و خارجی به ترتیب 4 و 4/35 متر و طول بدنه 67 متر می‌باشد. ظرفیت حرارتی این کوره 55 میلیون کالری بر ساعت و ظرفیت اسمی تولید سیمان در روز، 3300 تن می‌باشد [15]. برای تولید حرارت در میدان کوره از احتراق غیرپیش‌آمیخته گاز طبیعی و متان استفاده می‌شود. زمان انجام فرآیند درون کوره در حدود 40 دقیقه می‌باشد. در این شبیه‌سازی هندسه دوبعدی متقارن محوری مانند شکل 3 برای شبیه‌سازی احتراق درون کوره بدون مدل جریان مواد بستر در نظر گرفته می‌شود که در آن واکنش‌های شیمیایی مواد بستر بدون در نظر گرفتن جریان آن لحاظ شده است. همچنین در کار حاضر فرض می‌شود که هوای ثانویه به صورت یکنواخت از بالای مقطعی که سوخت و هوای اولیه وارد می‌شوند وارد می‌شود، بنابراین بخش ابتدایی کوره (طول L' ، طولی که مشعل وارد کوره می‌شود (شکل 2))، در شبیه‌سازی در نظر گرفته نشده است. البته لازم به ذکر است که با توجه به اینکه در این مدل فقط واکنش‌های مواد بستر بدون لحاظ کردن جریان مواد بستر مدل شده است، از هندسه متقارن محوری استفاده شده است. همان‌طور که در شکل 3 مشاهده می‌شود هوای مورد نیاز احتراق از نازل‌های هوای اولیه خطی، زاویه‌دار و ثانویه وارد می‌شوند. در مشعل‌های کوره دوار سیمان نازل هوای اولیه زاویه‌دار به منظور تغییر ابعاد شعله و همچنین ایجاد منطقه چرخشی درون جریان برای ایجاد پایداری شعله تعبیه شده است [25].

شرایط اولیه کوره، همان شرایط محیط اطراف یعنی دمای 303 K و

واکنشگاه نیمه مخلوط نیز مبتنی بر مدل مفهوم اتلاف گردابه شکل گرفته است که در آن هر سلول محاسباتی به دو ناحیه واکنشی و غیر واکنشی همگن تقسیم می‌شود [29]. در این مدل غلظت متوسط در سلول در اثر تبادل جرم بین ناحیه واکنشی و غیر واکنشی تغییر می‌کند. ناحیه واکنشی به صورت یک واکنشگاه اختلاط ایده‌آل¹ در نظر گرفته می‌شود [30]. در تحقیق حاضر مدل‌های احتراقی اتلاف گردابه، واکنشگاه نیمه مخلوط و کسر مخلوط² برای کوره‌های دوار سیمان مورد بررسی قرار می‌گیرند.

3-1-1-4- شرایط مرزی ناحیه احتراق

مرزهای ناحیه احتراق عبارتند از: مرز ورودی که محل قرار گرفتن مشعل است، مرز خروجی که محل خروج گازهای احتراقی است و مرز مشترک با دیواره کوره. در محل قرارگیری مشعل شرط مرزی سرعت ورودی برای ورودی‌های سوخت و هوا در نظر گرفته شده است. همچنین از شرط مرزی عدم لغزش روی دیواره‌ها برای سرعت استفاده می‌شود. روی مرز خروجی از شرط فشار نسبی صفر با قابلیت رخ دادن جریان برگشتی³ استفاده شده است، همچنین شرط مرزی فشار در دیواره‌ها از نوع گرادیان صفر می‌باشد و دیواره کوره عایق در نظر گرفته شده است. برای تشعشع شرط مرزی مارشاک⁴ با ضریب صدور تشعشعی 0/8 بر روی دیوار انتخاب شده است که در آن از دمای درون میدان برای محاسبه شدت تشعشع استفاده می‌شود [21]. برای شرط مرزی اغتشاش مقادیر طول اختلاط و شدت اغتشاش محاسبه می‌شود.

3-1-2- ناحیه واکنشی مواد بستر

مطابق جدول 1 واکنش‌های صورت گرفته درون کوره دوار سیمان هر کدام در محدوده دمایی خاصی در جریان مواد بستر انجام می‌پذیرند. بنابراین با توجه به محدوده دمایی جریان گازهای داغ ناشی از احتراق سوخت، این واکنش‌ها انجام می‌شوند. در نتیجه همزمان با حل جریان احتراقی نیاز به حل معادلات جریان مواد بستر وجود دارد. برای این کار کتابخانه‌ای به نام شیمی⁵ برای مواد موجود در بستر کوره به کتابخانه‌های آپن‌فوم افزوده شده است که قابلیت حل معادلات بقای گونه‌ها و جریان مواد بستر را به حلگر ری‌آکتینگ‌فوم اضافه می‌کند. کوپلینگ این ناحیه با سایر نواحی با در نظر گرفتن انتقال حرارت بین آن‌ها برقرار می‌شود. بنابراین معادله بقای گونه طبق معادله (7) به صورت یک‌بعدی به حلگر اضافه شده است [4].

$$\frac{\partial C_i}{\partial t} = R_i - v_s \frac{\partial C_i}{\partial z}, \quad i = \omega, \xi, \beta, \alpha, \gamma, \delta, F, S, A, G, M \quad (7)$$

در رابطه (7) C_i ، غلظت گونه‌های موجود، z ، راستای طول کوره و R_i نرخ تولید یا مصرف گونه i ام می‌باشد و طبق قانون تجربی تأثیر جرم⁶ بر اساس رابطه (8) برای گونه‌ها مطابق واکنش‌های جدول 1 به دست می‌آیند [25]:

$$aA + bB \rightarrow cC + dD$$

$$R \propto [A]^a [B]^b \Rightarrow R = k(T) [A]^a [B]^b \quad (8)$$

در رابطه (8) $k(T)$ نرخ واکنش‌ها برای گونه‌های جامد درون مواد بستر می‌باشد که با استفاده از قانون آرنیوس⁷ طبق رابطه (9) محاسبه می‌شود [25]:

$$k_i(T) = A_i \exp\left(-\frac{E_i}{RT_s}\right), \quad i = \xi, \alpha, \beta, \gamma, \delta, \omega, G, M \quad (9)$$

1- Partially Stirred Reactor (PSR)

2- Mixture fraction

3- Reverse Flow

4- Marshak Radiation

5- chemical

6- Law of mass action

7- Arrhenius' Law

8- PIMPLE
9- SIMPLE
10- PISO

جدول 1 واکنش‌های درون مواد بستر کوره دوار سیمان [16]**

نام واکنش	فرمول شیمیایی واکنش	انرژی حرارتی واکنش (kJ/kg)	محدوده دمایی (K)
1 تبخیر آب (گرماگیر)	$H_2O_{liq} \rightarrow H_2O_{vap}$	+2493	273-373
2 تجزیه $CaCO_3$ (گرماگیر)	$CaCO_3 \rightarrow CaO + CO_2$	+1780	823-1233
3 تجزیه $MgCO_3$ (گرماگیر)	$MgCO_3 \rightarrow MgO + CO_2$	+1395	823-1233
4 تشکیل C_2S (گرمازا)	$2CaO + SiO_2 \rightarrow C_2S$	-732	873-1473
5 تشکیل C_4AF (گرماگیر)	$4CaO + Al_2O_3 + Fe_2O_3 \rightarrow C_4AF$	+25	1473-1553
6 تشکیل C_3A (گرماگیر)	$3CaO + Al_2O_3 \rightarrow C_3A$	+25	1473-1553
7 تشکیل C_3S (گرماگیر)	$C_2S + CaO \rightarrow C_3S$	+59	1473-1553
8 تشکیل فاز مایع	$Clinker_{sol} \rightarrow Clinker_{liq}$	+600	>1553

** در صنعت سیمان از علائم اختصار برای معرفی ترکیبات استفاده می‌شود. $CaO = C, SiO_2 = S, Al_2O_3 = A, Fe_2O_3 = F, CaCO_3 = \zeta, CO_2 = \psi, C_4AF = \delta, C_2S = \beta, C_3S = \alpha, C_3A = \gamma$.
 $MgO = M, MgCO_3 = G$ و $H_2O = \omega$ بنابراین $C_3A = 3CaO \cdot Al_2O_3, C_2S = 2CaO \cdot SiO_2, C_3S = 3CaO \cdot SiO_2$ و $C_4AF = 4CaO \cdot Al_2O_3 \cdot Fe_2O_3$ در تحقیق حاضر مقادیر تمام گونه‌ها بر واحد جرم CaO محاسبه شده‌اند.

دو حالت با و بدون در نظر گرفتن تشعشع در محفظه، با نتایج تجربی مقایسه شده‌اند. در شکل 5 دمای جریان بر محور مرکزی محفظه نشان داده شده است. همان‌طور که مشاهده می‌شود در هر دو حالت با و بدون در نظر گرفتن تشعشع، تطابق مناسبی بین نتایج حل عددی و داده‌های تجربی مرجع [31] وجود دارد. با در نظر گرفتن تشعشع درون محفظه، با اعمال مدل تشعشعی جهات گسسته با 32 پرتو، دمای بیشینه درون محفظه 100 کلون کاهش یافته است و همان‌طور که مشاهده می‌شود مقادیر دما به مقادیر داده‌های تجربی مرجع [31] نزدیک‌تر شده است. نتایج به دست آمده حاکی از کارکرد مناسب حلگر توسعه‌یافته ری‌آکتینگ فوم تشعشعی می‌باشد.

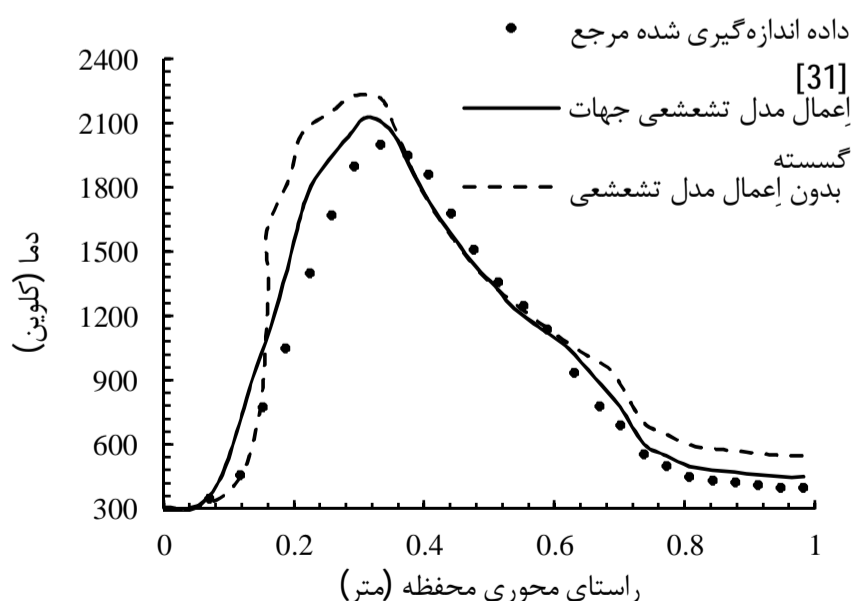
در ادامه برای راست‌آزمایی حل عددی با در نظر گرفتن واکنش مواد بستر، هندسه متقارن محوری کوره اصلی به طول 63 متر نظیر شکل 3 شبیه‌سازی شده است. که در آن متوسط دمای خروجی کوره و درصد تولید دی‌اکسید کربن (CO_2) از واکنش کلسینه شدن با داده‌های اندازه‌گیری شده از کوره سیمان شرکت فارس نو مقایسه شده‌اند. برای شبیه‌سازی از شبکه‌ای با ساختار منظم اما غیریکنواخت (با تراکم شبکه در نزدیکی دهانه نازل) استفاده شده است. مدل‌های استفاده شده عبارتند از مدل اغتشاشی کی-اِپسیلون، مدل احتراقی واکنشگاه نیمه مخلوط و مدل تشعشعی جهات گسسته با 16 پرتو. برای بررسی عدم وابستگی نتایج حل به شبکه محاسباتی، سه شبکه با تعداد سلول 1000000، 1600000 و 2800000 انتخاب و نتایج

فشار 1 atm می‌باشد. دبی هوای اولیه و سوخت ورودی به ترتیب m^3/hr 6800 در دمای 348 K و m^3/hr 7600 در دمای 348 K می‌باشد و نسبت دبی هوای ثانویه به سوخت 12 می‌باشد [15]. با توجه به دبی‌ها و مرتبه قطر نازل‌ها در این کوره سیمان، سرعت ورودی سوخت 110 m/s، هوای اولیه 20 m/s و هوای ثانویه 1 m/s می‌باشد.

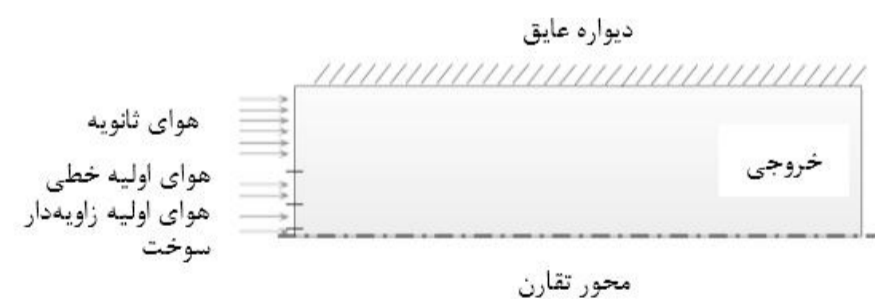
1-4- ملاحظات حل عددی

در ابتدا راست‌آزمایی حلگر توسعه‌یافته ری‌آکتینگ فوم تشعشعی، با در نظر گرفتن مسئله معیار منطبق بر کار بارلو و فرانک [31]، که شامل احتراق غیرپیش‌آمیخته متان و هوا در یک محفظه استوانه‌ای می‌باشد، انجام شده است. در شکل 4 طرحواره هندسه متقارن محوری در نظر گرفته شده برای مسئله معیار نشان داده شده است که در آن مقدار $L_1, 0/9 m, L_2, 0/1 m$ و $R, 0/15 m$ می‌باشد. سوخت، هوای اولیه و هوای ثانویه به ترتیب با سرعت m/s 49/6 در دمای 294 K، m/s 11/4 در دمای 1880 K و m/s 0/9 در دمای 291 K وارد محفظه می‌شوند [31].

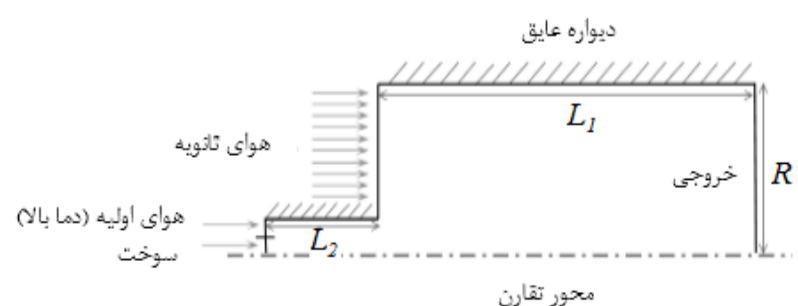
مدل‌های استفاده شده در این شبیه‌سازی عبارتند از مدل اغتشاشی کی-اِپسیلون و مدل احتراقی واکنشگاه نیمه مخلوط. برای حل مسئله در ابتدا عدم وابستگی حل عددی به شبکه محاسباتی بررسی شده و مشخص شد که تعداد شبکه بیش‌تر از 4608 سلول تغییری در نتایج حل عددی به وجود نمی‌آورد. پس از یافتن شبکه محاسباتی مناسب، نتایج حل عددی حاصل در



شکل 5 راست‌آزمایی حلگر توسعه‌یافته ری‌آکتینگ فوم تشعشعی، نمودار دمایی بر محور مرکزی محفظه در دو حالت با و بدون در نظر گرفتن تشعشع در مقایسه با داده‌های تجربی مرجع [31]



شکل 3 هندسه متقارن محوری کوره دوار سیمان



شکل 4 طرحواره مسئله احتراق غیرپیش‌آمیخته در محفظه استوانه‌ای

4-2- بررسی مدل‌های احتراقی

مدل‌سازی تقابل واکنش‌های شیمیایی و اغتشاش یکی از پیچیده‌ترین قسمت‌های مدل‌سازی محفظه‌های احتراق می‌باشد. در کوره‌های دوار سیمان فرآیند احتراق به صورت غیرپیش‌آمیخته صورت می‌گیرد. در انتخاب مدل احتراقی مناسب، عدد دامکولر¹ نقش بسزایی را ایفا می‌کند. عدد دامکولر به صورت رابطه (10) تعریف می‌شود [32].

$$Da = \frac{\tau_{mix}}{\tau_{chem}} = \frac{k/\varepsilon}{\sqrt{\mu/\rho\varepsilon}} \quad (10)$$

در رابطه (10)، τ_{mix} مقیاس زمانی اختلاط و τ_{chem} مقیاس زمانی واکنش می‌باشد. در جریان‌هایی که $Da \gg 1$ ، شدت واکنش در میدان کوره که به وسیله اختلاط آشفته در مقیاس مولکولی رخ می‌دهد، کنترل می‌شود و در جریان‌هایی که $Da < 1$ ، احتراق تحت کنترل واکنش شیمیایی بوده و باید از سینتیک‌های شیمیایی بر پایه مدل آرنیوسی استفاده کرد [32].

با توجه هندسه بسیار بزرگ کوره‌های دوار سیمان، محدوده تغییرات عدد دامکولر در میدان کوره زیاد می‌باشد. در تحقیق حاضر با استفاده از تعریف ارائه‌شده در رابطه (10)، عدد دامکولر در محدوده $0.7 < Da < 17$ در کل میدان کوره به دست آمده است. بنابراین انتخاب مدل احتراقی مناسب با توجه به محدوده وسیع تغییرات عدد دامکولر و تغییر مرتبه عدد دامکولر در میدان کوره دوار سیمان دشوار می‌باشد. در این صورت با توجه به ماهیت مدل‌های احتراقی می‌توان از مدل‌های مختلفی در شبیه‌سازی احتراق کوره دوار سیمان استفاده کرد. بر این اساس انتخاب یک مدل احتراقی مناسب با توجه به زمان بالای حل و همچنین شرایط موجود در کوره دوار سیمان، از قبیل سرعت بالای سوخت، هوای اولیه و ابعاد بزرگ شعله، بسیار مهم می‌باشد.

در این بخش مدل‌های احتراقی اتلاف گردابه، واکنشگاه نیمه مخلوط و کسر مخلوط برای کوره‌های دوار سیمان مورد بررسی قرار می‌گیرند. با توجه به محدودیت انتخاب مدل احتراقی در حلگر واکنشی ریآکتینگ فوم تشعشی در نرم‌افزار آپن فوم نسخه 2.0.1، مدل احتراقی واکنشگاه نیمه مخلوط با مدل‌های اتلاف گردابه و کسر مخلوط در نرم‌افزار فلونت² مقایسه می‌شوند. در نرم‌افزار فلونت نیز واکنش تجزیه کلسیم کربنات که واکنش اصلی در فرآیند تولید سیمان می‌باشد، با اضافه کردن تابع تعریف مشخص برای حل معادله بقای گونه‌های موجود در واکنش با توجه انتقال حرارت، با استفاده از UDF به حل اضافه شده است.

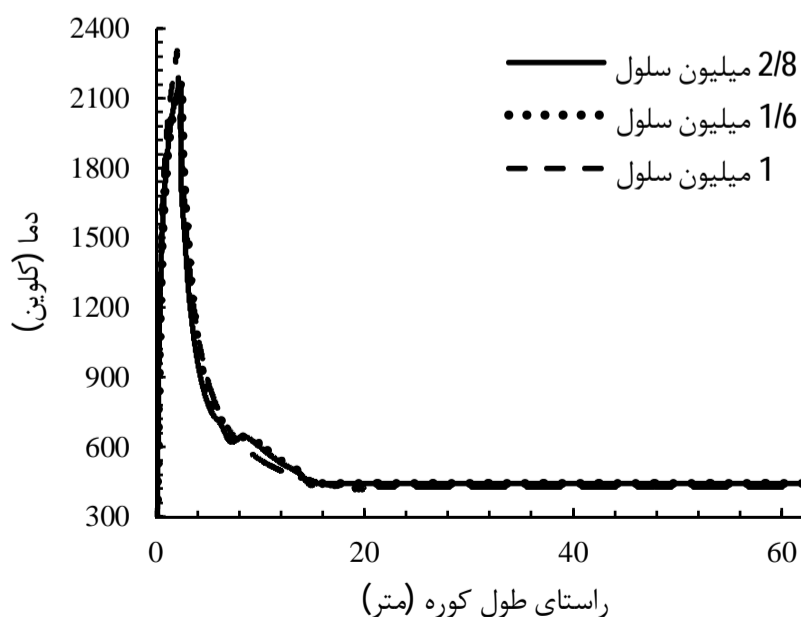
در شکل 7 نمودار دمای جریان گاز در راستای طول کوره برای سه مدل احتراقی مذکور نشان داده شده است. همان‌طور که مشاهده می‌شود مدل‌های واکنشگاه نیمه مخلوط و اتلاف گردابه دمای بیشینه درون کوره را در حدود 2300 کلوین پیش‌بینی می‌کنند. در حالی که مدل کسر مخلوط بیشینه دما را در حدود 2100 کلوین پیش‌بینی می‌کند. مکانیزم سینتیکی استفاده شده در مدل‌های واکنشگاه نیمه مخلوط و اتلاف گردابه مدل کلی یک‌مرحله‌ای می‌باشد. با توجه به مکانیزم یک‌مرحله‌ای در نظر گرفته شده محاسبه بیش از حد معمول دمای بیشینه درون کوره در مدل واکنشگاه نیمه مخلوط که در آن تأثیر هم‌زمان اختلاط مولکولی و واکنش شیمیایی بر نرخ احتراق لحاظ می‌شود، قابل قبول می‌باشد. در مدل اتلاف گردابه نیز به دلیل وابستگی نرخ احتراق به اختلاط مولکولی جریان بدون در نظر گرفتن واکنش‌های شیمیایی، بیشینه دمای درون کوره بالا به دست آمده است. در مدل کسر مخلوط با

حل روی هر کدام مقایسه شده است. شکل 6 نتایج دمای جریان گاز در راستای طول کوره برای این سه شبکه را نشان می‌دهد. همان‌طور که مشاهده می‌شود نتایج دو شبکه با 1600000 و 2800000 تعداد سلول تفاوت چندانی با هم ندارند. بنابراین شبکه با تعداد 1600000 سلول برای حل انتخاب شده است. مکانیزم شیمیایی به کار رفته، مکانیزم یک مرحله‌ای متان می‌باشد.

با اجرای شبیه‌سازی و مقایسه متوسط دمای خروجی از کوره و درصد CO₂ تولیدی از واکنش کلسینه شدن با داده‌های اندازه‌گیری‌شده، مطابق جدول 2، مشاهده می‌شود که تطابق قابل قبولی بین حل عددی و داده‌های اندازه‌گیری‌شده کوره سیمان شرکت فارس نو وجود دارد. مقدار CO₂ تولیدی از واکنش کلسیناسیون با استفاده از آنالیز شیمیایی مواد خروجی کوره نسبت به مواد ورودی کوره در کارخانه به دست آمده است. بنابراین می‌توان از مدل ارائه شده و تنظیمات عددی مربوط به آن برای مطالعات موردی کوره دوار سیمان استفاده کرد. لازم به ذکر است که دلایل پایین‌تر بودن متوسط دمای خروجی می‌تواند در نظر نگرفتن جریان مواد بستر در شبیه‌سازی که در واکنش‌های آن مقداری حرارت تولید می‌شود و همچنین خطای روش حل عددی باشد. البته با توجه به دشواری اندازه‌گیری داده‌ها در کوره دوار سیمان امکان خطا در اندازه‌گیری نیز وجود دارد. همچنین وجود خطا در مقدار CO₂ تولیدی از واکنش کلسیناسیون نیز می‌تواند به خاطر در نظر گرفتن مدل یک‌بعدی مواد بستر و همچنین لحاظ نکردن جریان مواد بستر در مدل باشد. همان‌طور که در شکل 6 مشاهده می‌شود از طول 20 متر به بعد تغییرات دمایی درون کوره بسیار کم می‌باشد، در کار حاضر برای بررسی مدل‌های احتراقی در کوره دوار سیمان، کوره‌ای به طول 20 متر با شرایط مشابه، برای شبیه‌سازی انتخاب شده است. به همین منظور در ابتدا عدم وابستگی حل به شبکه محاسباتی بررسی شده و مشخص شد که تعداد شبکه بیش‌تر از 520000 سلول تغییری در نتایج حل عددی به وجود نمی‌آورد.

جدول 2 مقایسه دمای متوسط خروجی و درصد CO₂ تولیدی از کلسیناسیون با داده‌های اندازه‌گیری‌شده و راست‌آزمایی حل عددی دوبعدی در کار حاضر

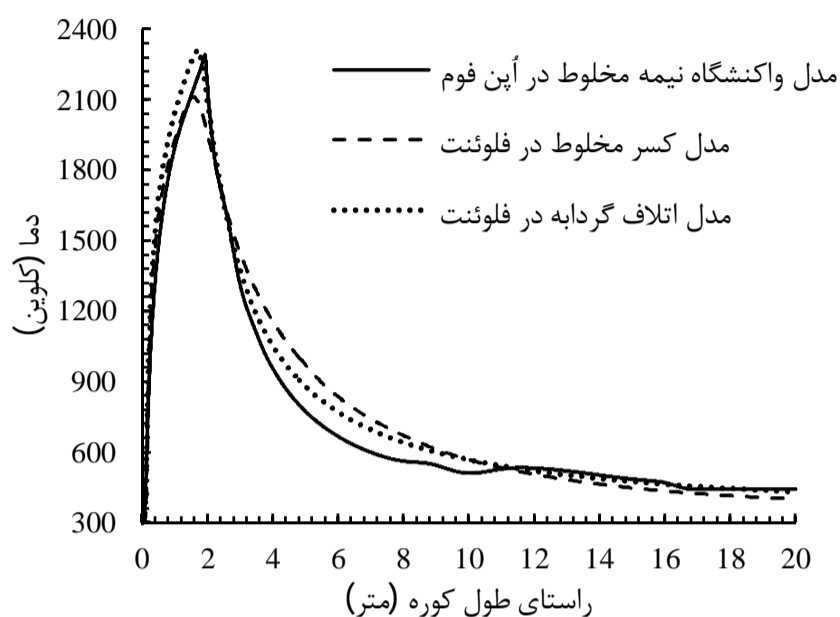
خطای نسبی (%)	داده اندازه‌گیری	حل عددی دوبعدی	متوسط دمای خروجی (K)
5/72	637/5	601	درصد CO ₂ تولیدی از واکنش کلسیناسیون (%)
25/95	33/34	44/66	



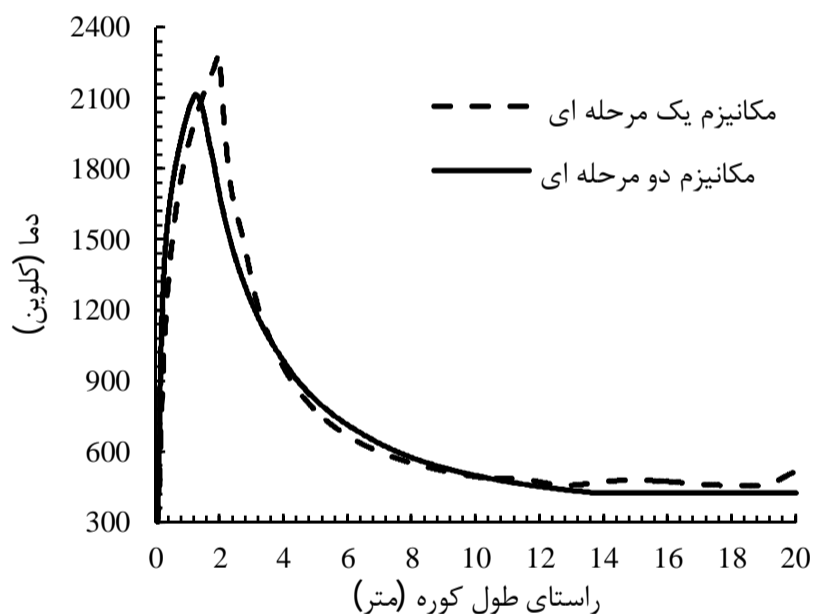
شکل 6 نمودار دمای جریان گاز در راستای طول کوره 63 متری به منظور بررسی عدم وابستگی حل به تعداد سلول محاسباتی

1. Damkohler (Da)
2. Fluent

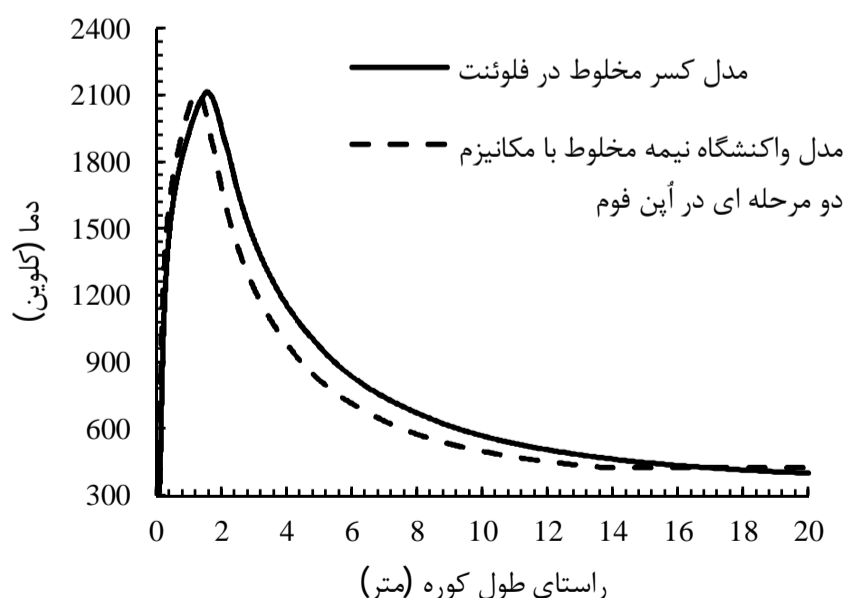
کاهش بسیار زیاد زمان حل، مورد استفاده قرار گیرد و رفتار جریان گاز را با دقت قابل قبولی پیش‌بینی کند. البته لازم به ذکر است که در محاسبه مقادیر گونه‌ها، مدل‌های احتراقی مانند واکنشگاه نیمه مخلوط که در آن‌ها واکنش‌های شیمیایی در محاسبه نرخ احتراق لحاظ می‌شوند و معادلات بقای گونه‌ها برای هر گونه حل می‌شوند، دقت بالاتری دارند.



شکل 7 نمودار تغییرات دمای جریان گاز در راستای طول کوره برای مدل‌های احتراقی مختلف



شکل 8 نمودار تغییرات دما در راستای طول کوره برای مکانیزم‌های 1 و 2 مرحله‌ای در مدل واکنشگاه نیمه مخلوط



شکل 9 مقایسه تغییرات دمای جریان گاز در راستای طول کوره بین دو مدل واکنشگاه نیمه مخلوط با بکارگیری مکانیزم دو مرحله‌ای سوخت و مدل کسر مخلوط

توجه به محاسبات تعادلی، دمای بیشینه درون کوره در حدود 190 کلوین کمتر از دو مدل دیگر به دست آمده است. البته لازم به ذکر است که ماهیت حلگرها در آپن فوم و فلوئنت نیز می‌تواند یک عامل مهم در اختلاف بین دماها و نتایج باشد.

یک نکته بسیار مهم در به کارگیری مدل‌های احتراقی فوق، زمان اجرای آن‌ها می‌باشد. با توجه به زمان‌مند بودن حلگر واکنشی آپن فوم، با استفاده از مدل احتراقی واکنشگاه نیمه مخلوط، زمان اجرا برای دستیابی به جواب‌های پایا برای کوره 20 متری با شرایط کوره اصلی، 10 روز به طول انجامید. زمان اجرا برای کوره 63 متری 25 روز به طول انجامید؛ اما در این حالت با توجه به اینکه طول کوره 20 متر می‌باشد و همچنین از نتایج نهایی کوره 63 متری به‌عنوان شرایط اولیه حل در کوره 20 متری استفاده شده است، زمان اجرا به 10 روز کاهش یافته است. در نرم‌افزار فلوئنت با توجه به امکان انتخاب نوع حل پایا، زمان اجرا با بکارگیری مدل‌های احتراقی اتلاف گردابه و کسر مخلوط به ترتیب 1 روز و 5 ساعت به طول انجامید. در زمان اجرا نیز ماهیت حلگرها در آپن فوم و فلوئنت نیز می‌تواند اثرگذار باشد. در تمام اجراها به جز مدل‌های احتراقی بقیه شرایط یکسان می‌باشند. با توجه به ماهیت مدل‌های احتراقی انتظار می‌رود که مدل واکنشگاه نیمه مخلوط جواب‌های دقیق‌تری برای مسئله داشته باشد. این امکان در صورت به کارگیری مکانیزم‌های تفصیلی برای سوخت میسر می‌شود که در نتیجه زمان حل با توجه به افزایش تعداد گونه‌ها بسیار افزایش می‌یابد. به همین دلیل این سوال پیش می‌آید از میان دو مدل دیگر کدام مناسب‌تر هستند؟ به همین منظور با در نظر گرفتن مدل احتراقی واکنشگاه نیمه مخلوط، شبیه‌سازی با استفاده از مکانیزم دو مرحله‌ای سوخت در نرم‌افزار آپن فوم مورد بررسی قرار می‌گیرد. مکانیزم‌های یک مرحله‌ای و دو مرحله‌ای استفاده شده به شرح زیر می‌باشند [25,33]:

• مکانیزم یک مرحله‌ای متان:



• مکانیزم دو مرحله‌ای متان:



در شکل 8 تغییرات دما در راستای طول کوره با بکارگیری مدل واکنشگاه نیمه مخلوط برای دو مکانیزم یک مرحله‌ای و دو مرحله‌ای نشان داده شده است. همان‌طور که مشاهده می‌شود با بکارگیری مکانیزم دو مرحله‌ای دمای بیشینه درون کوره 200 کلوین کاهش یافته است. با توجه به رابطه (12) در مکانیزم دو مرحله‌ای، گونه CO در محصولات وجود دارد. بدین معنی که احتراق ناقص انجام شده است و انرژی احتراق به‌طور کامل آزاد نشده است. در نتیجه در مقایسه با مکانیزم یک مرحله‌ای در رابطه (11) که احتراق کامل انجام شده است، انرژی کمتری از احتراق آزاد می‌شود. بنابراین دمای جریان کمتر پیش‌بینی می‌شود. در نظر گرفتن مکانیزم دو مرحله‌ای شرایط را به واقعیت نزدیک‌تر می‌کند.

با توجه به افزایش دقت مدل واکنشگاه نیمه مخلوط با استفاده از سینتیک دو مرحله‌ای متان، می‌توان از نتایج به‌دست آمده برای بررسی مدل‌های دیگر استفاده کرد. در شکل 9 پیش‌بینی دما در طول محفظه با استفاده از مدل واکنشگاه نیمه مخلوط با بکارگیری مکانیزم دو مرحله‌ای و نتایج مدل کسر مخلوط مقایسه شده‌اند. همان‌طور که مشاهده می‌شود نتایج برای مکانیزم دو مرحله‌ای در مدل واکنشگاه نیمه مخلوط و مدل کسر مخلوط اختلاف کمی با هم دارند. بنابراین می‌توان نتیجه گرفت که مدل کسر مخلوط می‌تواند برای شبیه‌سازی فرآیند احتراق کوره سیمان، با توجه به

به تأثیر دوران کوره بر انتقال حرارت درون کوره [7]، لحاظ کردن چرخش بدنه کوره و بررسی تأثیر آن بر انتقال حرارت بین نواحی مختلف درون کوره می‌تواند مورد بررسی قرار بگیرد.

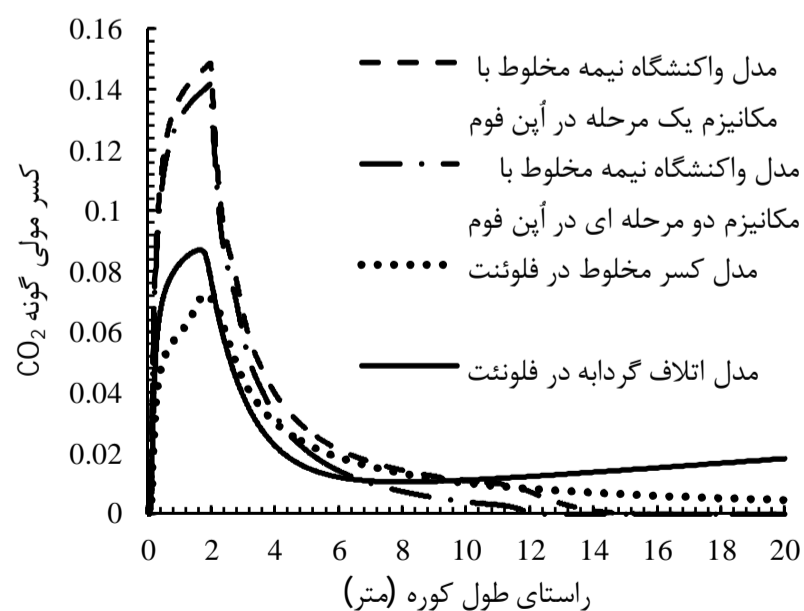
6- مراجع

- [1] S.Karelas, A. D. Leontaritis, G. Panousis, E. Bellos, E. Kakaras, Energetic and Exergetic analysis of waste heat recovery systems in the Cement Industry, Laboratory of Steam Boilers and thermal plants, National Technical University of Athens, Greece, June 2012.
- [2] N. A. Madlool, R. Saidur, N. Rahim, Investigation of Waste Heat Recovery in Cement Industry: A Case Study, *Int J Engineering and Technology*, Vol. 4, No. 5, pp. 665-667, 2012.
- [3] J. M. Blumberg, Modeling and control of the cement manufacturing process, PhD Thesis, University of Manchester, 1970.
- [4] H. A. Spang, A Dynamic model of a cement kiln, *Int J Automatica*, Pergamon Press, Vol. 8, pp. 309-323, 1972.
- [5] J. P. Gorog, T. N. Adams, J. K. Brimacombe, Heat transfer from flames in a rotary kilns, *Metallurgical Transactions*, Vol. 14, pp. 411-424, 1983.
- [6] P. V. Barr, J. K. Brimacombe, A. P. Watkinson, A Heat-Transfer Model for the Rotary Kiln: Part II. Development of the Cross-Section Model, *Metallurgical Transactions B*, Vol. 20, pp. 403-419, 1989.
- [7] A. A. Boateng, P. V. Barr, A thermal model for rotary kiln including heat transfer within the bed, *Int J Heat Mass Transfer*, Vol. 39, No. 10, pp. 2131-2147, 1996.
- [8] E. Mastorakos, A. Massias, C. D. Tsakiroglou, D. A. Goussis, V. N. Burganos, A. C. Payatakes, CFD prediction for cement kilns including flame modeling, heat transfer and clinker chemistry, *Applied Mathematical Modeling*, Vol. 23, pp. 55-76, 1999.
- [9] A. Loghmani, S. Megrshad, M. Sadighi, Statical simulation of rotary cement kiln, *10th National Symposium of Iran chemical engineering*, University of Sistan & Baluchestan, 1384. (In Persian)
- [10] K. S. Mujumdar, V. V. Ranade, Simulation of cement rotary kiln using a one- dimensional model, *ICHEM*, Vol. 84, No. A3, pp. 165-177, 2006.
- [11] P. Darabi, *A Mathematical Model for Cement Kilns*, Master of Science Thesis, University of British Columbia, 2006.
- [12] M. Pisoni, R. Sadi, D.Lahaye, Counteracting ring formation in rotary kilns, *Springer open Journal of Mathematical in Industry*, 2012.
- [13] M. A. Romero Valle, *Numerical Modeling of Granular Flows in Rotary kilns*, Master of Science Thesis, Faculty of Electrical Engineering, Mathematical and Computer Science Delft University of Technology, 2012.
- [14] M. Pisoni, R. Sadi, D.Lahaye, *Almatis-TU Delft Seminar on Numerical Modeling of Rotary Kilns*, Delft University of technology, 2011.
- [15] R. Keshavarz, A. Gharacheh, P. Aghajari, Analysis of mass and energy balances and distribution of input and output energies in cement industry kiln department, *2nd International conference of cement industry, energy and environment*, University of Tehran, 1392. (In Persian)
- [16] F. Mintus, S. Hamel, W. Krumm, Wet process rotary cement kilns: modeling and simulation, *Int J Clean Techn Environ Policy*, Vol. 8, pp. 112-122, 2006.
- [17] W. Paul, *Rotary Kiln: Transport Phenomena and Transport Process*, Vol.1 & Vol.2, Vancouver, British Columbia, October 2007.
- [18] T. Poinso, D. Veynate, *Theoretical and Numerical Combustion*, 2nd ed., Edward, Inc., Philadelphia, U.S.A., 2005.
- [19] G. Heidarinejad, *An introduction to turbulence*, Author ed., 1388. (In Persian)
- [20] *ANSYS CFX-Solver Theory Guide*, ANSYS, Inc., Canonsburg, Pennsylvania, 2012.
- [21] A. Vdovin, A. O. Gonzalez, *Radiation heat transfer in OpenFOAM*, Goteborg, Chalmers University of Technology, 2009.
- [22] *Open FOAM The open source CFD Toolbox User guide*, Version 2.3.0, 2014.
- [23] F. C. Lockwood, N. G. Shah, A New Radiation Solution Method for Incorporation in General Combustion Prediction Procedures, *Eighteenth Symposium (International) on Combustion*, The Combustion Institute, Waterloo, Canada, pp. 1405-1414, 1981.
- [24] H. K. Versteeg, W. Malalasekera, *An Introduction to Computational Fluid Dynamics*, 2nd Edition, Edinburg Gate, Harlow, England, 2007.
- [25] S. R. Turns, *An Introduction to Combustion-Concepts and Application*, Chap. 6, 2nd Edition, McGraw-Hill Series in Mechanical Engineering, 2000.

در شکل 10 اختلاف بین مقادیر گونه CO₂ تولید شده از واکنش احتراق در کوره سیمان برای مدل‌های احتراقی مختلف مشاهده می‌شود. این اختلاف ناشی از اختلاف دما و همچنین دقت مدل احتراقی مورد نظر می‌باشد. با توجه به اینکه تقریباً نیمی از CO₂ تولیدی در کوره دوار سیمان از واکنش احتراق سوخت حاصل می‌شود، بنابراین محاسبه دقیق این گونه بسیار حائز اهمیت می‌باشد. بر این اساس انتخاب مدل احتراقی در محاسبه این گونه تأثیر بسزایی خواهد داشت. همان‌طور که در شکل 10 مشاهده می‌شود تغییرات اصلی گونه CO₂ در محدوده نزدیک به مشعل کوره (سمت چپ نمودار) می‌باشد. با در نظر گرفتن جریان مواد بستر و واکنش‌های درون آن در شبیه‌سازی، مقدار تولید CO₂ از واکنش مواد بستر می‌تواند مورد بررسی قرار بگیرد.

5- جمع‌بندی و نتیجه‌گیری

در کار حاضر مدلی برای شبیه‌سازی عددی کوره دوار سیمان ارائه شد که فرآیندهای احتراق آشفته و غیرپیش‌آمیخته گاز طبیعی و هوا، تشعشع و واکنش مواد بستر درون کوره بدون لحاظ کردن جریان را در نظر می‌گیرد. پس از دستیابی به تطابق مناسب نتایج حل عددی و داده‌های اندازه‌گیری، از مدل مذکور برای بررسی مدل‌های احتراقی درون کوره دوار سیمان و پردازش موازی استفاده شد. نتایج نشان دادند که از لحاظ زمان اجرا مدل واکنشگاه نیمه مخلوط زمان‌برترین و مدل کسر مخلوط سریع‌ترین مدل می‌باشند. همچنین مدل کسر مخلوط، علاوه بر کاهش قابل ملاحظه زمان حل، فیزیک جریان را با دقت مناسبی پیش‌بینی می‌کند. گرچه بررسی‌های انجام‌شده در کار حاضر دید مناسبی از شرایط درون کوره دوار سیمان می‌دهد، ولی بررسی دقیق‌تر عملکرد کوره، از نظر شرایط بهینه کارکرد و انتقال حرارت بین نواحی مختلف درون کوره، نیازمند اضافه کردن مدل‌های جریان مواد بستر کوره، انتقال حرارت درون بدنه کوره و همچنین در نظر گرفتن اندرکنش آن‌ها با جریان احتراقی درون میدان کوره در یک مدل کاملاً سه‌بعدی می‌باشد. با توجه به دقت قابل قبول مدل احتراقی کسر مخلوط در کوره دوار سیمان و همچنین کاهش چشمگیر زمان اجرا، با توجه به هندسه بسیار بزرگ کوره، پیشنهاد می‌شود در ادامه کار، شبیه‌سازی سه‌بعدی کوره دوار سیمان با در نظر گرفتن مدل احتراقی کسر مخلوط و در نظر گرفتن واکنش مواد بستر درون کوره و اندرکنش آن با واکنش‌های احتراق انجام شود. همچنین با توجه



شکل 10 تغییرات گونه CO₂ در راستای محوری طول کوره برای مدل‌های احتراقی مختلف

- [29] J. Chomiak, and A. Karlsson, Flame liftoff in diesel sprays, *Proceedings of the Combustion Institute*, Vol. 26, pp. 2557-2564, 1996.
- [30] N. Nordin, *Complex chemistry modeling of diesel spray combustion*, Ph.D Thesis, Chalmers University of Technology, Goteborg, Sweden, 2001.
- [31] R. S. Barlow, J. H. Frank, Effects of Turbulence on Species Mass Fractions in Methane/Air Flames, *Proceedings of the Combustion Institute*, Vol. 27, pp. 1087-1095, 1998.
- [32] D. Veynante, and L. Vervisch, Turbulent combustion modeling, *Progress in Energy and Combustion Science*, Vol. 28, pp.193-266, 2002.
- [33] A. Frassoldati, A. Cuoci, T. Faravelli, E. Ranzi, C. Candusso, D. Tolazzi, Simplified kinetic schemes for oxy-fuel combustion, *1st International conference on sustainable fossil fuels for future energy*, Italy, 2009.
- [26] D. B. Spalding, Mixing and chemical reaction in steady confined turbulent flames, *Symposium (International) on Combustion*, Vol. 13, pp. 649-657, 1971.
- [27] B. F. Magnussen, and B. H. Hjertager, On the mathematical modeling of turbulent combustion with special emphasis on soot formation and combustion, *Proceedings of the Combustion Institute*, Vol. 16, pp. 719-729, 1976.
- [28] B. F. Magnussen, On the structure of turbulent and a generalized eddy dissipation concept for chemical reaction in turbulent flow, *19th American Institute of Aeronautics and Astronautics Aerospace Science Meeting*, St. Louis, Missouri, USA, January 12-15, 1981.