

A 2-Dim CFD model development for petroleum coke calcination process in rotary kiln

Mohammad Hosein Eghbal Ahmadi^{*1}, Shokoufe Tayyebi²

1. Department of Chemical Engineering, Tafresh University, Tafresh 39518 79611, Iran.
2. Petroleum Refining Technology Development Division, Research Institute of Petroleum Industry, Tehran, Iran.

Abstract

Subject: Petroleum coke calcination is a chemical process during which the petroleum coke loses moisture and volatile combustible materials due to the increase in temperature and ultimately improves the physical properties of the calcined coke. In this study, A 2-Dim model was developed for the petroleum coke calcination process via rotary kiln using the CFD approach. Understanding the temperature, concentration, and fluid movement behavior are the main goals for developing the simulation model, by using which the rotary kiln control and design can be performed.

Methodology: Comsol Multiphysics was applied to develop the simulation model. Petroleum coke rotary kiln calcination consists of two solid and gas phases, which cross each other counter-currently. All governing physics in the system, including chemical reactions, heat transfer via conduction, convection, and radiation, intra-phase and interphase mass transfer, evaporation or evolution of components from the solid phase into the gas phase, fluid turbulence and all complex relationships were considered. Using the finite element method, the governing equations of the model were solved, and consequently, the variation of temperature, components concentration, and fluid velocity was calculated.

The main results: It is concluded that tertiary air injection significantly affects the temperature profile and combustion reactions in the bed (About 100 degrees increase in temperature). In addition, the maximum temperature of 1910 °C has been achieved in the kiln. Concentration changes of components in the gas phase were also seen mainly in the bed entrance and in the areas near the tertiary air injection. Comparing the results with similar works showed the high accuracy of the developed model.

key words

Calcination

Petroleum coke

Rotary kiln

Modeling

CFD

*To whom correspondence should be addressed:
mh.eghbalahmadi@tafreshu.ac.ir

توسعه مدل دوبعدی CFD برای فرایند کلسیناسیون کک نفتی در کوره دوار

محمدحسین اقبال احمدی^۱، شکوفه طیبی^۲

۱- عضو هیات علمی گروه مهندسی شیمی، دانشگاه تفرش، تفرش، ایران
۲- پژوهشکده توسعه فناوری‌های پالایش و فرآورش نفت، پژوهشگاه صنعت نفت، تهران، ایران

چکیده

موضوع تحقیق: کلسیناسیون کک نفتی فرایندی شیمیایی است که طی آن کک نفتی به علت بالا رفتن حرارت، رطوبت و مواد احتراق‌پذیر فرار را از دست می‌دهد و در نهایت ارتقای خواص فیزیکی کک کلسینه را باعث می‌شود. در این مقاله، فرایند کلسیناسیون کک نفتی توسط کوره دوار بررسی و به کمک روش CFD به صورت دوبعدی مدل‌سازی می‌شود. هدف از مدل‌سازی و شبیه‌سازی آن، شناخت رفتار دمایی، غلظتی و حرکت سیال گاز داخل کوره است، تا بتوان بر اساس شناخت به‌دست آمده، طراحی و کنترل آن را به درستی انجام داد.

روش تحقیق: برای این منظور از نرم‌افزار کامسول کمک گرفته شد. کوره دوار کلسیناسیون کک نفتی شامل دو فاز جامد و گاز است که به‌صورت ناهمسو از کنار هم عبور می‌کنند. همه فیزیک‌های پیچیده موجود در سامانه، شامل واکنش‌های شیمیایی، انتقال حرارت‌های هدایتی، جابجایی و تشعشعی، انتقال جرم‌های درون‌فازی و بین‌فازی، تبخیر و رهایی مواد از فاز جامد به فاز گاز، ملاحظات آشفته‌گی جریان و روابط پیچیده آن در نظر گرفته شد. در نتیجه حل مدل به روش المان محدود، تغییرات متغیرهای اصلی شامل دما، غلظت مواد و سرعت سیال در بستر به دست آمد.

نتایج اصلی: نتایج نشان داد که تزریق میان بستری هوا نقش مهمی در ایجاد تغییرات در دما (حدود ۱۰۰ درجه افزایش) و سرعت گرفتن واکنش‌های احتراق دارد. هم‌چنین بیشترین دمای کوره ۱۹۱۰ کلوین به‌دست آمد. تغییرات غلظت مواد در فاز گاز نیز عمدتاً در هنگام ورود به بستر و در نواحی نزدیک تزریق میان بستری دیده شد. مقایسه نتایج با کارهای مشابه نشان از دقت بالای مدل‌سازی انجام شده بود.

کلمات کلیدی

کلسیناسیون

کک نفتی

کوره دوار

مدل‌سازی

CFD

*مسئول مکاتبات:

mh.eghbalahmadi@tafreshu.ac.ir

۱ مقدمه

کک نفتی ماده‌ای تیره و جامد است که از ته‌مانده‌های سنگین نفتی تولید می‌شود. این ماده به‌صورت توده‌ای از هیدروکربن‌های سنگین است و نسبت هیدروژن به کربن آن بسیار کم است. کلسیناسیون (Calcination) کک نفتی فرایندی است که طی آن کک نفتی (کک سبز) به علت بالا رفتن حرارت، رطوبت و مواد احتراق‌پذیر فرار را از دست می‌دهد و ساختار بی‌شکل و بی‌نظم آن به ساختار بلورین تبدیل شده که موجب افزایش هدایت الکتریکی و چگالی واقعی می‌شود و در نهایت خواص فیزیکی کک کلسینه را ارتقا می‌دهد [۱]. کک کلسینه برای صنایع مختلفی مثل صنعت آلومینیوم، صنعت فولادسازی و تولید سوخت، مورد استفاده قرار می‌گیرد [۲].

شایع‌ترین روش کلسیناسیون کک نفتی استفاده از کوره دوار (Rotary kiln) است. مدل‌سازی و شبیه‌سازی فرایند کلسیناسیون کوره دوار مهم‌ترین گام برای طراحی بهینه و کنترل آن است. غالب مدل‌های ارائه شده در مقالات به فرایند کلسیناسیون مورد استفاده در صنعت سیمان با خوراک سنگ آهک پرداخته‌اند و تحقیقات کمتری در مورد خوراک کک نفتی و رویکرد پالایشگاهی موجود است. مهم‌ترین و پیچیده‌ترین اتفاقی که در فرایند کلسیناسیون می‌افتد، بحث احتراق و سوختن ماده جامد با هدف تکلیس آن است. به طور کلی واکنش‌های سوختن کک نفتی بسیار پیچیده و متنوعند و هنوز هم سینتیک جامعی برای آن در این فرایند ارائه نشده است. از طرفی شیوع فرایند کلسیناسیون سیمان به‌طور کلی بیشتر در صنعت دیده می‌شود و به همین دلیل تحقیقات بیشتری روی آن انجام شده است.

در سال ۱۹۶۲، لیونز و همکاران [۳] اولین مدل فرایند کلسیناسیون را برای سیمان به‌صورت یک‌بعدی و ساده و با فرضیات زیاد ارائه کردند. برخی مقالات و تحقیقات به‌طور ویژه بر روی هیدرودینامیک بستر، محاسبه ضرایب انتقال حرارت و جرم، محاسبه سینتیک واکنش‌ها و غیره تمرکز کرده‌اند. از اولین موارد مربوط به این مقالات، مقاله لی در سال ۱۹۷۴ [۴] است که به‌طور ویژه بر روی پدیده رهایی در سیلندرهای چرخان بود که حرکت ذرات داخل بستر جامد، رهايش آن‌ها از سطح جامد و برخورد ذرات با جداره داخلی در هنگام چرخش دورانی کوره را بررسی کرده و روابطی متعدد برای آن‌ها ارائه کردند. اسنهای و همکاران [۵]، به‌طور ویژه به احتراق بستر جامد و ذرات کوچک پرداختند و روابطی برای محاسبه سینتیک آن‌ها با در نظر گرفتن نفوذ و رهايش در بستر جامد ارائه کردند که بعدها در بسیاری مدل‌سازی‌ها در مقالات استفاده شد. کارهای مشابه برای بررسی انتقال حرارت درون بستر فرایند کلسیناسیون، محاسبات تشعشع، سرعت و تنش انجام شد [۶-۱۰]. پرون و همکاران [۱۰] به بررسی حرکت بستر جامد در کوره‌های دوار پرداختند و به کمک تحلیل ابعادی روابطی برای محاسبه سرعت، تنش و غیره به‌دست آوردند. پرون و همکاران همچنین در کار دیگری مدلی یک بعدی برای شبیه‌سازی فرایند کلسیناسیون کک نفتی در کوره دوار پیشنهاد دادند که در مقاله دیگر [۱۱]، نتایج شبیه‌سازی آن را منتشر کردند. در مدل آن‌ها، پدیده‌های مختلف انتقال حرارت تشعشعی، هدایتی و جابه‌جایی به همراه واکنش‌های

داخل بستر جامد و فاز گاز و همچنین انتقال جرم مواد بین فاز جامد و گاز در نظر گرفته شد. مجموعه معادلات دیفرانسیل حاکم بر مدل توسط روش آدامز مولتون مرتبه چهار حل شد و توزیع دما و غلظت در طول بستر به‌دست آمد. آن‌ها همچنین در مقاله سوم خود بهینه‌سازی فرایند به همراه بررسی اثر متغیرهای عملیاتی را ارائه کردند [۱۲]. در کار دیگری که توسط مارتین و همکاران [۱۳] انجام شد، مدل مورد استفاده توسط پرون و همکاران مقداری توسعه پیدا کرد و مواردی مانند بهبود محاسبات سرعت واکنش در بستر جامد (واکنش سوختن کک) و استفاده از روابط دیگری برای محاسبه سرعت بستر جامد در مدل آن‌ها در مقایسه با مدل پرون در نظر گرفته شد. ضعف هر دو کار به معلوم نبودن و تجربی بودن بسیاری از ثوابتی است که در معادلات واکنشی، انتقال حرارت و انتقال جرم آن‌ها گزارش شده بود. همچنین استفاده از رویکرد یک‌بعدی علی‌رغم ساده شدن حجم محاسبات، به‌دلیل ماهیت آن، قابلیت محاسبه بسیاری از تغییرات شعاعی را ندارد. در سال ۲۰۱۶، سرنی و همکاران [۱۴]، مدلی یک‌بعدی به همراه حل عددی برای کلسیناسیون سیمان ارائه کردند. از بسیاری جنبه‌ها، روند مدل‌سازی و حل عددی آن‌ها با کار مارتین و همکاران [۱۳] که برای کک نفتی انجام شده بود، شباهت داشت. توسعه مدل یک‌بعدی برای کلسیناسیون در کارهای دیگران در سال‌های دیگر تکرار شد [۱۵]. عمده تفاوت به نوع روابط مورد استفاده، شرایط هندسی کوره، در نظر گرفتن تزریق‌های میان بستری و غیره مربوط می‌شد. استفاده از نرم‌افزارهای شبیه‌سازی مانند هاپسیس نیز برای شبیه‌سازی فرایند کلسیناسیون کک نفتی دیده شده است [۱۶ و ۱۷]. البته، انجام شبیه‌سازی توسط چنین نرم‌افزارهایی که قابلیت رویکرد میکروسکوپی ندارند، از دقت بالایی برخوردار نیست. مدل‌سازی چندبعدی (همراه با فرضیات ساده کننده زیاد) نیز توسط محققین برای فرایند کلسیناسیون کک و سیمان انجام شده است [۱۸]. مطالعه بر روی جنبه‌های مصرف انرژی و اکسرژی کلسیناسیون سیمان در کوره دوار توسط اتماکا و همکاران [۱۹] انجام شد. آن‌ها با آنالیز ترمودینامیکی کوره به ساختار مؤثر و پربازدهی برای مصرف انرژی رسیدند. آن‌ها نشان دادند که به‌طور معمول حدود ۱۱ درصد از انرژی توسط دیواره به محیط اتلاف می‌شود. استفاده از CFD و رویکرد مدل‌سازی سه‌بعدی نیز در برخی مقالات دیده شده است که البته عمده تحقیقات بر روی کلسیناسیون سیمان متمرکز شده‌اند [۲۰ و ۲۱]. توجه شود که استفاده از رویکرد CFD به خودی خود دقت بالایی را البته به قیمت پیچیدگی‌های زیاد به ارمغان می‌آورد و طبیعی است که در نظر گرفتن فرضیات و محدود کردن دامنه حل در بسیاری موارد اجتناب‌ناپذیر است. به‌دلیل پیچیدگی موجود در فرایند کلسیناسیون و به خصوص زمانی که از خوراک کک نفتی استفاده می‌شود، هنوز جای خالی مدل جامعی که همه پدیده‌ها را با حداقل فرضیات در نظر بگیرد، احساس می‌شود. از آخرین نمونه مدل‌سازی‌هایی که انجام شده مربوط به کار ریان و همکاران [۲۲] اشاره کرد که به‌صورت دوبعدی کوره دوار کلسیناسیون سیمان را مدل کردند.

کوره دوار به‌دلیل ماهیت دوفازی آن، عملاً در سه بعد زاویه، طول و شعاع دارای تغییرات است. البته با توجه به

است افت کند، ناحیه کلسینه (Calcining zone) است که عمده کلسیناسیون در آنجا اتفاق می افتد [۲]. برای احیای مجدد بستر، از تزریق های میان بستری که به «هوای سوم» معروف است، استفاده می شود.

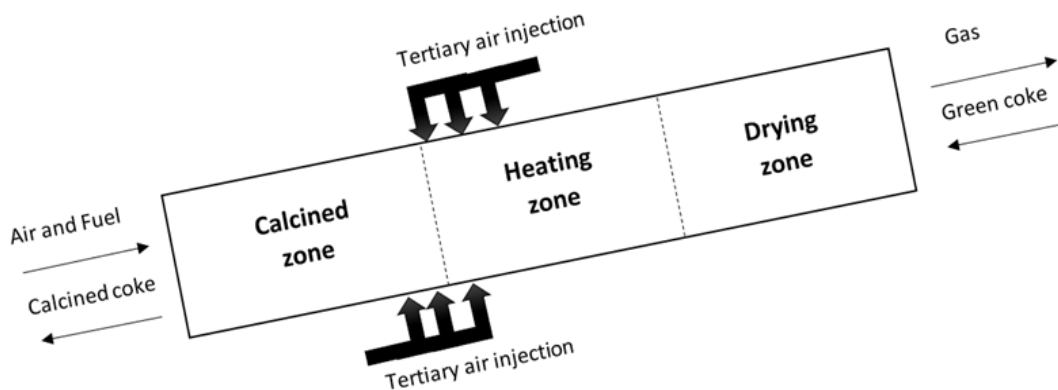
۲-۲ فیزیک های حاکم

مهم ترین مرحله در ساخت مدل و انجام شبیه سازی توسط کامسول، تعیین و تعریف پدیده های فیزیکی یا به طور خلاصه، فیزیک حاکم بر مسئله است. تشخیص این پدیده ها مبتنی بر تجربه و دانش مهندسی شیمی و البته مبتنی بر این نکته است که متغیرهایی اصلی که تغییرات آن ها مورد توجه است، کدامند. قاعدتاً مدل های پیچیده تر که پدیده های حاکم بر آن ها بیشتر و پیچیده ترند، منجر به مسائل چندفیزیکی دشوارتر می شوند که البته با انتخاب درست فیزیک ها و کوپل کردن ماهرانه آن ها می توان به همگرایی مناسب رسید.

اتفاقات عمده ای که در سامانه می افتد، شامل انتقال ذرات بین فاز جامد و گاز، انتقال ذرات درون فاز به خصوص در فاز گاز، انتقال حرارت بین فاز گاز با گاز،

رفتار دوار آن و همزدگی ایجاد شده، می توان از تابعیت زاویه گذشت. اما تابعیت شعاعی دما، غلظت و سایر متغیرها قابل توجه است و صرف نظر از آن ها سبب ایجاد خطای بالایی در نتایج مدل می شود. البته در مدل های یک بعدی به دلیل سادگی ریاضیات عددی حل معادلات، می توان پدیده های بیشتری را در مدل لحاظ کرد، اما به هر حال توسعه مدل های چندبعدی به مراتب نسبت به مدل های یک بعدی ارجحیت دارد.

در این مقاله برای اولین بار مدلی جامع و دوبعدی با در نظر گرفتن همه فیزیک های موجود در فرایند کلسیناسیون کک نفتی شامل واکنش های فاز جامد و گاز، انتقال حرارت های هدایتی، جابه جایی و تشعشعی، انتقال جرم های درون فازی و بین فازی، تبخیر و رهایی مواد از فاز جامد به فاز گاز، ملاحظات آشفنگی جریان و روابط پیچیده آن توسعه داده شده است. از نرم افزار کامسول و روش حل المان محدود برای محاسبات عددی و به دست آوردن نتایج استفاده شده است. در نظر نگرفتن فرض های ساده کننده مانند سیال تراکم ناپذیر، خواص ثابت ناحیه گاز و غیره از ویژگی های متمایز مدل توسعه داده شده است، که نتایج آن را می توان در مقایسه با سایر مدل های توسعه داده شده به واقعیت نزدیک تر کرد.



شکل ۱ نواحی سه گانه کوره دوار کلسیناسیون کک نفتی
Figure 1. Three different zones in rotary kiln for petroleum coke calcination

گاز به جامد، گاز و جامد با دیواره و سامانه با محیط و در نهایت حرکت آشفته فاز گاز به عنوان سیال سامانه در راستای طولی و شعاعی هستند. به همین دلیل در این کار، فیزیک های انتخاب شده در شبیه سازی شامل فیزیک جریان آشفته سیال (k-ε The Turbulent Flow Interface) (با روش k-ε)، فیزیک انتقال گونه های درون یک مخلوط (The Transport of Concentrated Species Interface)، انتقال حرارت در سیال و جامد (The Heat Transfer in Solids and Fluids Interface) و تشعشع (The Radiation in Participating Media Interface) در نظر گرفته شدند. برخلاف مدل های سنتی آشفنگی، مدل k-ε بر روی مکانیزمی که بر انرژی جنبشی ناشی از تلاطم اثر می گذارد، تمرکز می کند. همچنین یکی از مهم ترین فرضیات این روش آن است که گرانیروی آشفنگی، آیزنروپیک است، به عبارت دیگر، نسبت

۲ بخش نظری

۱-۲ توسعه مدل

در این بخش بستری برای توسعه مدلی دوبعدی به منظور بررسی تغییرات دما و ترکیب درصد مواد در طول بستر ایجاد می شود. با توجه به واکنش ها و پدیده هایی که در حین انتقال فاز جامد از بالا به پایین از یک طرف و عبور گاز از روی بستر در جهت مخالف در طرف دیگر، صورت می پذیرد، عملاً کوره دوار کلسیناسیون کک نفتی را می توان به ۳ ناحیه مختلف تفکیک کرد. ناحیه اول ناحیه خشک کننده (Drying) است که محدوده دمایی در آن کمتر از نواحی دیگر است و اتفاق اصلی ای که در این ناحیه می افتد، تبخیر آب موجود در کک است. ناحیه بعدی که ناحیه گرم شونده (Heating zone) نام دارد، دما تا حدود ۱۵۰۰ درجه سانتی گراد ممکن است بالا برود و پدیده اصلی که دیده می شود رهايش مواد فرار از بستر کک است. در ناحیه سوم که دما به بیشینه می رسد و البته دوباره ممکن

به شرح زیرند:

$$C_{\mu}=0.09, \quad \sigma_{\epsilon}=1.3, \quad \sigma_k=1, \quad C_{\epsilon 1}=1.44, \quad C_{\epsilon 2}=1.92$$

معادله اصلی دیگر مدل توسعه داده شده برای کوره دوار مربوط انتقال جرم ذرات است که در زیر ارائه شده است.

$$\nabla \cdot j_i + \rho(u \cdot \nabla) \omega_i = R_i \quad (5)$$

که در آن ω_i کسر جرمی ماده i ، R_i رابطه سرعت واکنش، j_i نشان دهنده نفوذ ماده i است.

معادله مومنتم نیز به شرح زیر است:

$$\rho(u \cdot \nabla)u = \nabla \cdot [-pI + K] + F \quad (6)$$

که در آن F نیروی حجمی است و K توسط رابطه زیر به دست می آید.

$$K = (\mu + \mu_T)(\nabla u + (\nabla u)^T) - \frac{2}{3}(\mu + \mu_T)(\nabla \cdot u)I - \frac{2}{3}\rho kI \quad (7)$$

همچنین از معادله زیر برای محاسبات تغییرات دما استفاده شد.

$$\rho C_p u \cdot \nabla T + \nabla \cdot q = Q \quad (q = -k \nabla T) \quad (8)$$

که در آن C_p ظرفیت گرمایی، T دما، q مقدار حرارت منتقل شده هدایتی و Q نیز نماینده سایر گرماهای موجود (در اثر واکنش و غیره) است.

به دلیل تعداد زیاد فیزیک‌ها و پدیده‌های حاکم، با چهار میدان حل مختلف سروکار داریم. میدان حل سیال که بر اساس فیزیک $k-\epsilon$ است و تمام هندسه را به جز قسمت بستر فاز جامد پوشش می‌دهد. میدان حل انتقال مواد نیز شبیه میدان حل سیال در نظر گرفته می‌شود. میدان حل انتقال حرارت میدان سوم است که تمام هندسه را پوشش می‌دهد، زیرا در تمام نواحی انتقال حرارت موجود است. در نهایت، میدان حل تشعشع را در نظر گرفته ایم که این میدان حل شبیه میدان حل سیال در نظر گرفته می‌شود.

۲-۳ تعریف واکنش‌ها

واکنش‌های بستر عملاً احتراق‌های اصلی شامل احتراق مواد فرار، احتراق متان و احتراق کک را در مدل شامل می‌شوند.

بین تنش رینولدزی و میانگین نرخ تغییرات در تمام جهات یکسان است. مدل‌های سنتی‌تر دارای چنین جامعیتی نیستند. به طور خلاصه، تغییرات جریان سیال و تنش‌های مربوطه توسط فیزیک اول، انتقال جرم مواد درون فاز گاز و بین دو فاز گاز و جامد توسط فیزیک دوم و محاسبات انتقال حرارت توسط سازوکارهای هدایتی، جابه‌جایی و تشعشع توسط فیزیک سوم و چهارم انجام می‌شود.

معادلات حاکم بر مدل

معادلات اصلی حاکم بر مدل در فرم کلی‌شان در زیر نشان داده‌اند. معادله پیوستگی به شرح زیر است.

$$\nabla \cdot (\rho u) = 0 \quad (1)$$

که در آن ρ چگالی سیال و u سرعت آن است.

مدل $k-\epsilon$ که یکی از پر استفاده‌ترین مدل‌های آشفتگی برای مدل‌سازی جریان‌هاست، شامل دو معادله اصلی دیفرانسیل برای توضیح رفتار آشفتگی و تلاطم جریان است. دو متغیر اصلی این روش که نام این روش هم از آن‌ها الهام گرفته است، عبارتند از: انرژی جنبشی تلاطمی (k) و نرخ پراکندگی انرژی جنبشی (ϵ) [۲۳]. رابطه مورد استفاده برای k و ϵ در معادلات ۲ و ۳ نشان داده شده است.

$$\rho(u \cdot \nabla)k = \nabla \cdot \left[\left(\mu + \frac{\mu_T}{\sigma_k} \right) \nabla k \right] + P_k - \rho \epsilon \quad (2)$$

$$\rho(u \cdot \nabla)\epsilon = \nabla \cdot \left[\left(\mu + \frac{\mu_T}{\sigma_{\epsilon}} \right) \nabla \epsilon \right] + C_{\epsilon 1} \frac{\epsilon}{k} P_k - C_{\epsilon 2} \frac{\epsilon^2}{k} \rho \quad (3)$$

در معادلات فوق، μ_T گرانیوی گردابه‌ها است. همچنین μ گرانیوی و P_k مربوط به نرخ تغییرات است و از رابطه زیر به دست می‌آید.

$$P_k = \mu_T \left[(\nabla u + (\nabla u)^T) - \frac{2}{3}(\nabla u)^2 \right] - \frac{2}{3}\rho k \nabla \cdot u \quad (4)$$

تفسیر معادلات فوق که در واقع یک موازنه است، به این صورت است که:

نرخ تغییرات k = انتقال k با سازوکار نفوذ + نرخ تولید k منهای نرخ تخریب یا مصرف k

نرخ تغییرات ϵ = انتقال ϵ با سازوکار نفوذ + نرخ تولید ϵ منهای نرخ تخریب یا مصرف ϵ

علاوه بر متغیرهای توضیح داده شده مجموعه‌ای از ثوابت قابل تنظیم نیز در دو معادله فوق حضور دارند، که به کمک داده‌های موجود در مقالات تنظیم شده و

پایا در نظر گرفته شد.

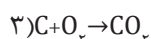
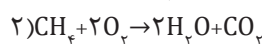
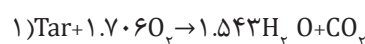
خواص بستر کک ثابت و خواص ناحیه گاز متغیر در نظر گرفته شد.

واکنش‌های شیمیایی سریع‌تر از مقیاس زمانی گردابه‌های تلاطمی در نظر گرفته شد. انتقال حرارت با محیط بیرون هم در نظر گرفته شده است. (در برخی مطالعات مانند [۲۰ و ۲۱]، شرایط عایق فرض شده است).

از آنجایی که در مدل، نفوذ پدیده حاکم نیست، معادلات انتقال جرم بر اساس معادلات فیک در نظر گرفته شدند.

شرایط مرزی و پارامترهای مدل

در جدول ۱ شرایط مرزی ورودی و خروجی به همراه شرایط دیواره‌های مدل تعریف‌شده نمایش داده شده است. همچنین در جدول ۲، پارامترهای اصلی هندسی،



که در آن Tar (قطران) همان مواد سنگین موجود در کک هستند. سینتیک این واکنش‌ها نیز به شرح زیر است [۲۰ و ۲۱].

$$-r_{\text{tar}} = 2.11 \times 10^{11} e^{\left(\frac{-2.027 \times 10^8 [\text{J/kmol}]}{RT}\right)} C_{\text{Tar}} C_{\text{O}_2} \quad (9)$$

$$-r_{\text{CH}_4} = 10^{15} e^{\left(\frac{10^8 [\text{J/kmol}]}{RT}\right)} C_{\text{CH}_4} C_{\text{O}_2} \quad (10)$$

$$-r_{\text{C}} = 10^{15} e^{\left(\frac{10^8 [\text{J/kmol}]}{RT}\right)} C_{\text{C}} C_{\text{O}_2} \quad (11)$$

جدول ۱ شرایط مرزی ورودی، خروجی و دیواره‌های مدل
Table 1. Boundary conditions for inlet, outlet and walls of the model

Air stream velocity (m/s)	20	Air and fuel composition (mass)	2:0.22 CH ₄ :0.43 N ₂ :0.737
Methane mass flow rate (kg/h)	230.37	Air and fuel temperature (K)	300
Tertiary air velocity (mass)	50	Tertiary air temperature (K)	300
Tertiary air composition (mass)	O ₂ :0.23 N ₂ :0.77	Outlet gas pressure (atm)	1
No-slip	Wall type	Tertiary air location (m)	15

فیزیکی و شیمیایی نمایش داده شده است.
مش‌بندی

مش ساختار گسسته مدل دوبعدی است. به کمک مش مثلثی، مدل مش‌زنی شد و در نواحی نزدیک مرزهای ورودی هوای سوم (به دلیل نیاز به دقت بالاتر و هم‌گرایی بهتر)، از مش‌های ریزتری استفاده شد. همچنین، حساسیت به مش بررسی شد و در نهایت کل

با توجه به اینکه واکنش‌ها از نوع ابتدایی نیستند، با انجام تغییراتی بر بستر کدنویسی در نرم‌افزار، معادلات فوق تعریف شدند.

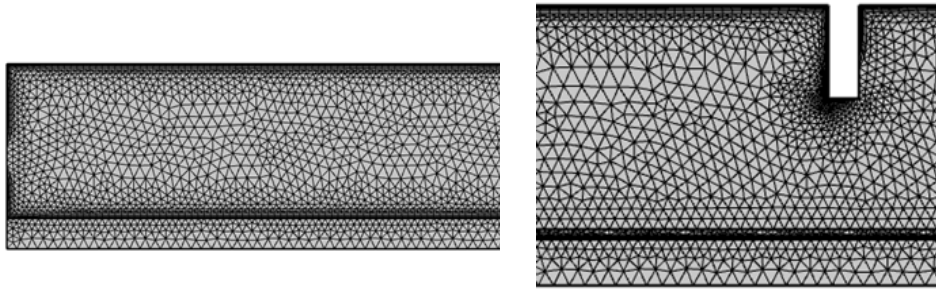
۴-۲ فرضیات مدل

مدل توسعه داده شده مبتنی بر فرضیاتی است که در ادامه توضیح داده می‌شوند:

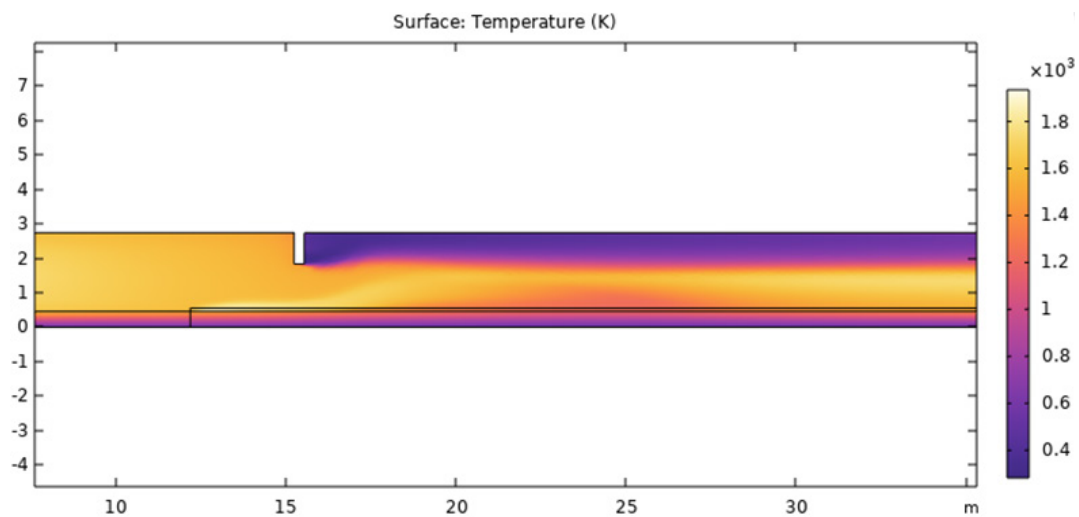
جریان سیال به صورت تراکم‌پذیر، آشفته و

جدول ۱ شرایط مرزی ورودی، خروجی و دیواره‌های مدل
Table 1. Boundary conditions for inlet, outlet and walls of the model

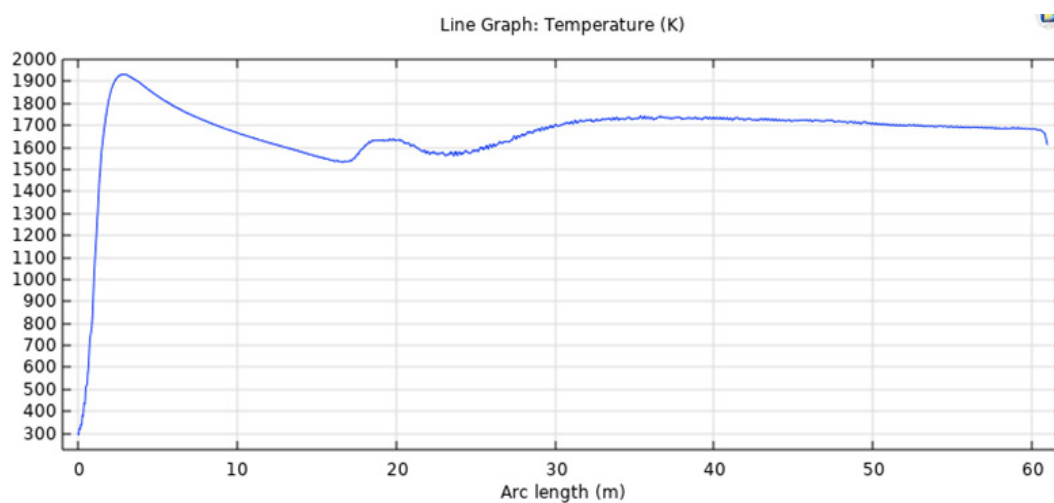
Radiation absorption coefficient in gas	0.2	Heat capacity of CH ₄ (J/kg.K)	5009.2
Rotary kiln diameter (m)	1.38	Heat capacity of CO ₂ (J/kg.K)	1280.6
Diffusion coefficient in gas (m ² /s)	0.0000288	Heat capacity of O ₂ (J/kg.K)	1115
Heat capacity of C (J/kg.K)	1730	Heat capacity of N ₂ (J/kg.K)	1203
Heat capacity of H ₂ O (J/kg.K)	2429.2	Heat capacity of Tar (J/kg.K)	1730



شکل ۲ مش‌زنی مدل کوره دوار (سمت چپ: قسمت ورودی هوای اصلی، سمت راست: قسمت ورودی هوای سوم)
Figure 2. The mesh structure of rotary kiln model (left side: The main air inlet part, right side: Tertiary air injection part)



شکل ۳ تغییرات دما در طول بستر
Figure 3. 3Dim temperature variation along the bed



شکل ۴ تغییرات دما در طول بستر (برش یک‌بعدی در مرکز کوره)
Figure 4. 4Dim temperature variation along the bed.

می‌شود تا اینکه به محل ورودی هوای سوم به بستر نزدیک می‌شویم. به دلیل تقویت مجدد غلظت اکسیژن و سرعت گرفتن مجدد واکنش‌های سوختن، دوباره شاهد خیز دمایی هستیم. بالا رفتن غلظت قطران تا فاصله حدود ۳۰ متری خود باعث تقویت جزئی واکنش سوختن می‌شود. از بعد آن، تا موقعیت خروجی از سمت راست کوره، پدیده شیمیایی خاصی که سبب تغییرات دما شود در بستر وجود ندارد و روند تدریجی نزولی تغییرات دما در قسمت یک‌سوم پایانی نیز مؤید همین مطلب است. البته پدیده تبخیر آب در یک‌سوم پایانی بستر نیز وجود دارد، اما تأثیر زیادی بر تغییرات دما ندارد. به‌طور کلی شاهد قله‌های دمایی ۱۹۱۰، ۱۶۲۰

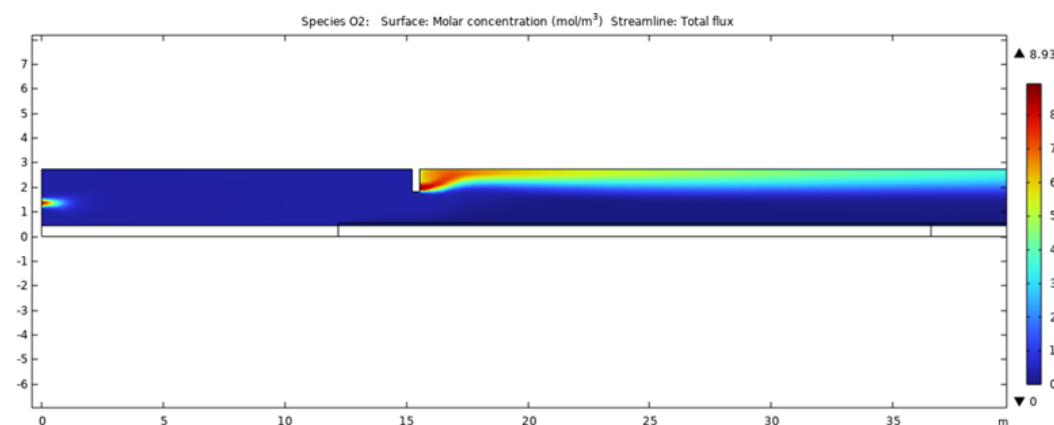
مدل به تعداد ۲۶۵۲۳ المان تقسیم شد. در شکل (۲) برشی از مش نهایی استفاده شده در دو ناحیه مختلف از مدل نشان داده شده است.

۳ نتایج و بحث

در نتیجه حل مدل توسعه داده شده به کمک روش المان محدود، توزیع غلظت، دما و سرعت سیال در بستر سیال کوره دوار به‌دست آمد که در ادامه به تفکیک ارائه می‌شوند.

۳-۱ تغییرات دما

نمودار تغییرات دوبعدی و یک‌بعدی دمای گاز عبوری



شکل ۵ تغییرات غلظت اکسیژن در طول بستر
Figure 5. Oxygen concentration variation along the bed

و ۱۷۱۰ کلوین در تغییرات دما هستیم.

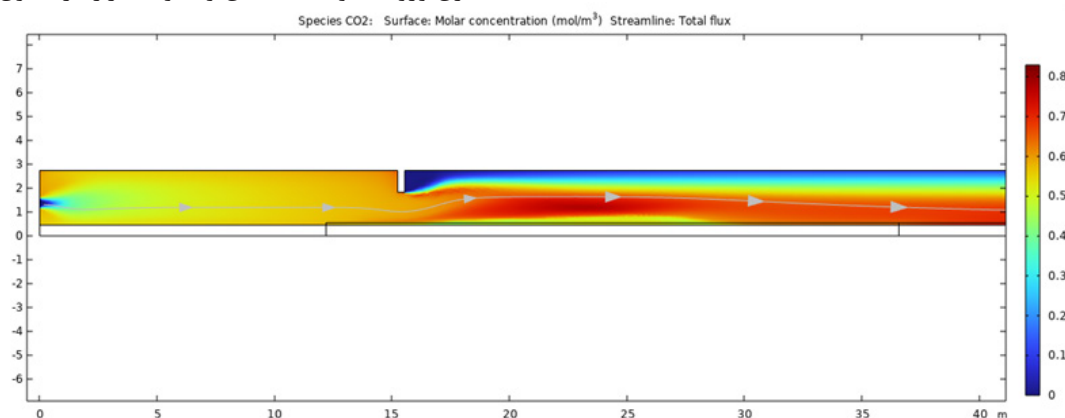
۳-۲ تغییرات غلظت گونه‌های اصلی

تغییرات غلظت گونه‌های اصلی شامل اکسیژن، دی‌اکسیدکربن، آب و قطران در فاز گاز در نمودارهای زیر نمایش داده شده است.

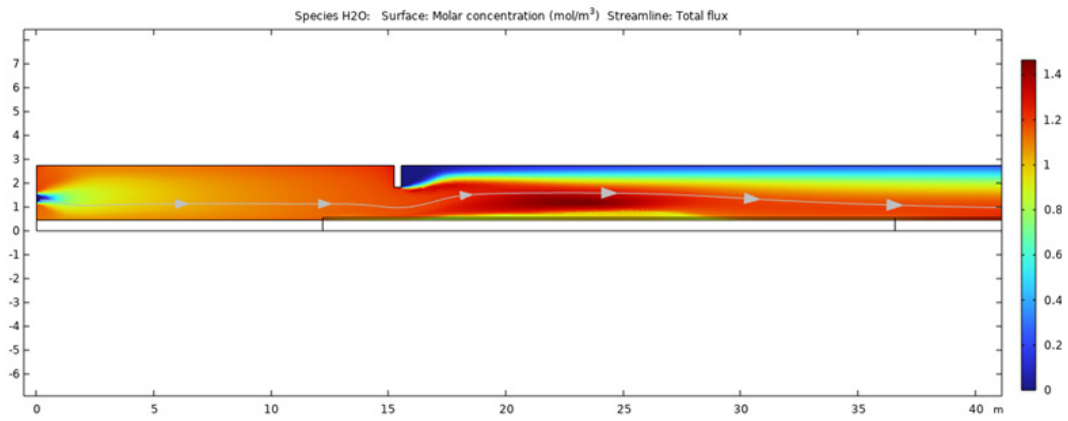
همان‌طور که در شکل (۵) مشاهده می‌شود، در قسمت تزریق هوای اصلی و هوای سوم شاهد افزایش قابل‌ملاحظه‌ای در غلظت اکسیژن هستیم. از آنجایی که اکسیژن ورودی توسط متان و مواد فرار در طول بستر

در کوره نسبت به محور طولی در شکل (۳) نمایش داده شده است.

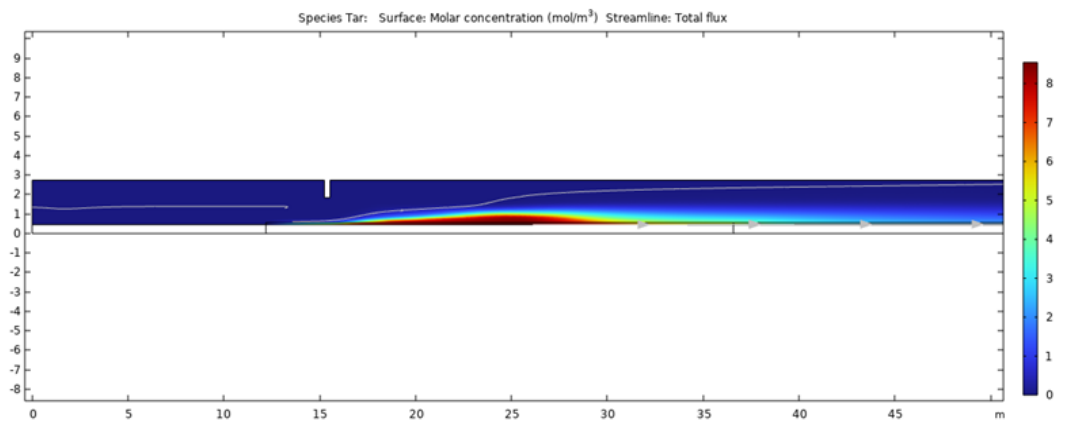
همان‌طور که در شکل‌های ۳ و ۴ نشان داده شده است، دمای ورودی به بستر با ۳۰۰ درجه کلوین شروع می‌شود. سپس به دلیل انجام واکنش‌های سوختن که در ابتدای بستر به دلیل حضور اکسیژن زیاد قدرت بیشتری دارند، شاهد افزایش دما هستیم. سپس به دلیل کاهش غلظت اکسیژن و مواد سوختنی، تا حدود دمای ۱۵۵۰ کلوین افت دمایی در گاز ایجاد



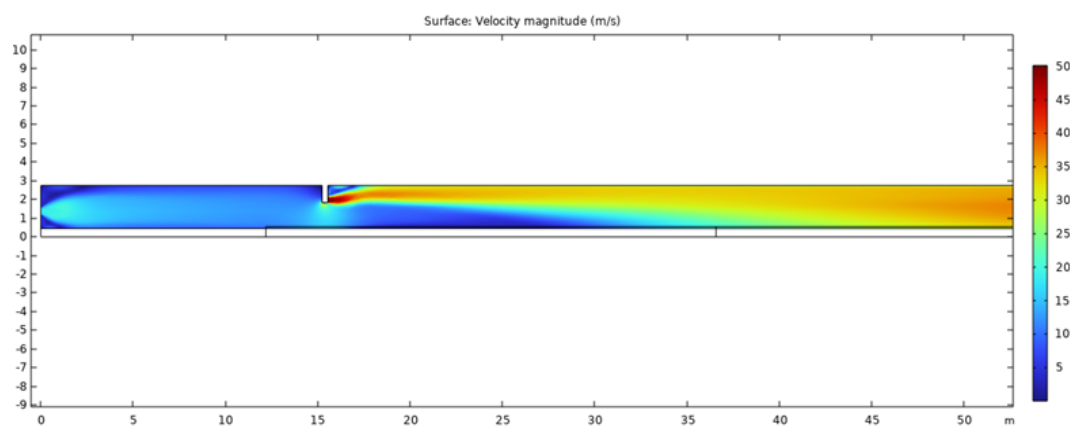
شکل ۶ تغییرات غلظت CO_۲ در طول بستر
Figure 6. CO_۲ concentration variation along the bed



شکل ۷ تغییرات غلظت آب در طول بستر
Figure 7. Water concentration variation along the bed



شکل ۸ تغییرات غلظت قطران در طول بستر
Figure 8. Tar concentration variation along the bed



شکل ۹ تغییرات سرعت حرکت گاز در طول بستر
Figure 9. Gas movement velocity variation along the bed

از ذرات جامد فاصله می‌گیریم)، شاهد غلظت‌های کمتری از قطران هستیم.

۳-۳ تغییرات سرعت سیال در بستر

همان‌طور که در شکل (۹) مشاهده می‌شود، در قسمت‌هایی که تزریق هوای اضافه به بستر داریم، شاهد افزایش سرعت هستیم. تغییرات سرعت جریان گاز عمدتاً از حل معادلات فیزیک جریان متلاطم با تئوری $k-\epsilon$ به دست می‌آید.

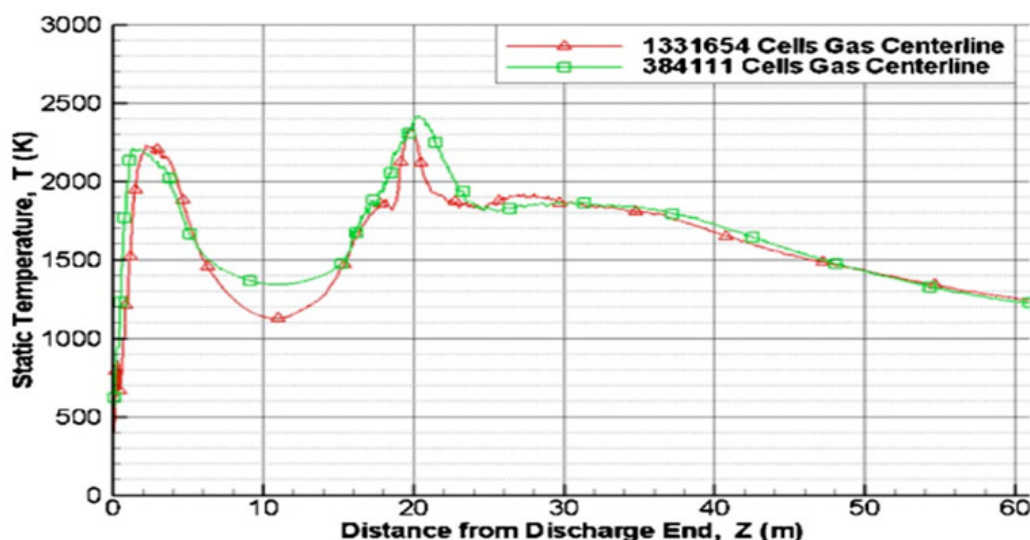
اعتبارسنجی نتایج

به دلیل آنکه داده‌های آزمایشگاهی و مدل‌سازی مشابهی در مقالات برای کلسیناسیون کک نفتی وجود نداشت، مقایسه نتایج کار حاضر عملاً غیرممکن بود. تنها کار موجود، مربوط به ژنگ و همکاران [۲۱] است. ژنگ و همکاران مدل‌سازی مشابهی برای کلسیناسیون کک نفتی انجام دادند که در آن از نرم‌افزار فلوئنت کمک گرفتند. در مقایسه با کار حاضر، آن‌ها فرضیات بیشتری شامل تراکم‌ناپذیر در نظر گرفتن فاز گاز و در نظر نگرفتن انتقال حرارت کوره با محیط اطراف را در کار خود اعمال کردند. تغییرات دمایی گزارش شده توسط آن‌ها در نمودار زیر برای دو نوع مش‌زنی

پس از تزریق به دلیل واکنش سوختن مصرف می‌شود، شاهد کاهش غلظت آن تا رسیدن به خروجی هستیم. در قسمت‌های دیگر بستر هم غلظت اکسیژن پایین است، زیرا به دلیل سرعت بالای واکنش سوختن، اکسیژن به سرعت مصرف می‌شود.

تغییرات غلظت CO_p در بستر، قاعدتاً باید بر خلاف اکسیژن باشد، زیرا با مصرف اکسیژن و پیشروی واکنش‌های متعدد سوختن در بستر، شاهد تولید CO_p هستیم. همان‌طور که در شکل (۶) مشخص است، اوج تولید و غلظت‌های CO_p را می‌توان بعد از تزریق و در ناحیه نزدیک بستر دید که به دلیل سوختن مواد فرار و هم‌چنین سایر مواد احتراق در فاز گاز شاهد افزایش غلظت CO_p هستیم.

به دو دلیل باید شاهد تغییرات آب در بستر باشیم. یکی به دلیل واکنش سوختن که علاوه بر CO_p ، آب نیز تولید می‌شود و دیگری به دلیل تبخیر آب از بستر که عموماً در یک‌سوم اول ورود ذرات کک به کوره دیده می‌شود. همان‌طور که در شکل (۷) دیده می‌شود، تقریباً بعد از تزریق هوای سوم، بیشترین غلظت‌های آب را شاهد هستیم. البته در سمت چپ کوره دوار نیز



شکل ۱۰ تغییرات دمای کوره دوار در طول آن بر اساس نتایج مقاله ژنگ و همکاران [۲۱]
Figure 10. Temperature variation along the rotary kiln based on Zhang et al. results [21]

متفاوت نمایش داده شده است.

دما، اصلی‌ترین متغیر در طول کوره است که به دلایل مختلف (انجام واکنش، انتقال حرارت‌های رسانشی، جابه‌جایی و تشعشعی، رهایی و تبخیر مواد، تزریق هوا و غیره) در جای جای بستر دچار تغییرات می‌شود. همان‌طور که با مقایسه شکل (۴) و شکل (۱۰) می‌توان دریافت نتایج حاصل از شبیه‌سازی کار حاضر، تطابق خوبی با روند حاصل از کار ژنگ و همکاران دارد و متوسط خطای بین کار حاضر و نتایج آن‌ها حدود ۱۵ درصد است. البته تفاوت‌های مهمی

که هوای اولیه وارد بستر شده باز به دلیل واکنش سوختن و تولید آب، شاهد مقداری آب در داخل فاز گاز هستیم.

در یک‌سوم اول و یک‌سوم دوم ورود ذرات کک (به‌خصوص در یک‌سوم دوم)، بیشترین رهایی ذرات قطران به درون فاز گاز صورت می‌پذیرد که البته پس از رهایی، شاهد سوختن آن‌ها در فاز گاز هم هستیم. در شکل (۸) مشاهده می‌شود که در حدود فاصله ۱۵ تا ۳۰ متری افزایش غلظت قطران اتفاق می‌افتد و در نواحی دیگر (به‌خصوص وقتی در راستای عمودی

هستیم. در قسمت‌های پایانی بستر روندی کاهشی به خود می‌گیرد. غلظت دی‌اکسیدکربن در ابتدا مقادیر متوسط و با شدت گرفتن واکنش‌های سوختن، زیاد می‌شود به طوری که به اعداد حدود $0/8$ مول بر مترمکعب نیز می‌رسد. غلظت آب نیز در جاهایی از بستر به غلظت $1/4$ مول بر مترمکعب می‌رسد. بیشترین تغییرات غلظت مواد به جز قطران، در ناحیه ورودی اصلی هوا و ناحیه تزریق هوای سوم دیده می‌شود، به دلیل آنکه این مواد گونه‌هایی هستند که به عنوان ماده واکنش‌دهنده یا محصول در واکنش سوختن حضور دارند. تغییرات غلظت قطران در ناحیه یک سوم میانی بیشتر دیده شد که عمده دلیل آن رهایی این ماده از فاز جامد به درون فاز گاز است.

در مدل توسعه داده شده توسط آن‌ها و مدل توسعه داده شده در این کار وجود دارد که قاعدتاً اختلافاتی در نتایج ایجاد می‌کند. به عنوان مثال ژنگ و همکاران [۲۱] از نرم‌افزار فلونت استفاده کردند. روش حل نرم‌افزار فلونت استفاده از روش حجم محدود است، در حالی که نرم‌افزار کامسول که در کار حاضر از آن کمک گرفته شده است، از روش المان محدود کمک می‌گیرد و تفاوت‌های جزئی این دو روش عددی به طور قطع باعث تفاوت‌هایی در نتایج می‌شود. در کار ژنگ و همکاران [۲۱]، سیال را تراکم‌ناپذیر در نظر گرفته‌اند که اصلاً فرض خوبی نیست. این فرض معادلات تغییرات چگالی که به همراه معادلات مومنتم و جرم حل می‌شوند را از لیست معادلات مدل حذف می‌کند، اما تغییرات محسوس چگالی به خصوص در فاز گاز را در نظر نمی‌گیرد. از آنجایی که در کار حاضر تمرکز اصلی نیز بر روی مدل تغییرات دما و غلظت در فاز گاز بوده است، تغییرات چگالی در نظر گرفته شد و اثرات خود را بر روی نتایج متغیرها گذاشت. تفاوت عمده دیگر کار ژنگ و همکاران [۲۱]، صرف نظر کردن از انتقال حرارت با بیرون است و به همین دلیل متوسط دمای داخل کوره آن‌ها مقداری بالاتر از نتایج دمایی کار حاضر است. اختلاف دمای فاحش داخل کوره (که در برخی نقاط به 1900 کلوین نیز می‌رسد) با دمای بیرون، انتقال حرارت مشخصی را باعث می‌شود که باعث کاهش دمای داخل می‌شود.

۴ نتیجه‌گیری

در این کار، مدلی دوبعدی برای پیش‌بینی رفتار کوره دوار کلسیناسیون کک نفتی توسعه داده شد و به کمک روش المان محدود حل شد. در نتیجه آن، تغییرات دما، غلظت و سرعت گاز به دست آمد. برای توسعه مدلی جامع، تمام پدیده‌های حاکم بر کوره دوار شامل واکنش‌های فاز جامد و گاز، انتقال حرارت‌های هدایتی جابه‌جایی و تشعشعی بین فاز جامد و گاز و با دیواره، انتقال جرم‌های درون‌فازی و بین‌فازی، ملاحظات آشفته‌گی جریان و روابط پیچیده آن در نظر گرفته شد. نتایج تغییرات دما نشان‌دهنده وجود دو منطقه حساس دمایی با بیشترین تغییرات دما بود. این مناطق شامل قسمت ورودی هوای اصلی و قسمت تزریق هوای سوم بود که به ترتیب شاهد اوج دمایی 1910 ، 1620 کلوین بودیم. همچنین، نتایج نشان داد که تزریق میان بستی نقش مهمی در ایجاد تغییرات در دما (حدود 100 درجه افزایش) و سرعت گرفتن واکنش‌های احتراق دارد. تغییرات غلظت مواد اصلی موجود در گاز شامل O_2 ، CO_2 ، H_2O و Tar به صورت دوبعدی به دست آمد. نحوه تغییرات غلظت اکسیژن به طور متوسط روندی افزایشی در طول بستر است، زیرا در نواحی مختلف شاهد افزایش آن به دلیل تزریق

مراجع

- [1] Edwards L., The History and Future Challenges of Calcined Petroleum Coke Production and Use in Aluminum Smelting, *JOM*, 67, 308-321, 2015.
- [2] Boateng A.A., Rotary Kilns: Transport Phenomena and Transport Processes, Butterworth-Heinemann, Oxford, 2015.
- [3] Lyons J.W., Min H.S., Parisot, P.E. and Paul J.F. Experimentation with a Wet-Process Rotary Cement Kiln via the Analog Computer, *Industrial & Engineering Chemistry Process Design and Development*, 1, 29-33, 1962.
- [4] Li K.W. Entrainment in Rotary Cylinders, *AIChE Journal*, 20, 1031-1034, 1974.
- [5] Essenhigh R.H., Froberg R. and Howard J.B. Combustion Behavior of Small Particles, *Industrial & Engineering Chemistry*, 57, 32-43, 1965.
- [6] Modak A.T. Radiation from Products of Combustion, *Fire Safety Journal*, 1, 339-361, 1979.
- [7] Tscheng S.H. and Watkinson A.P. Convective Heat Transfer in a Rotary Kiln, *The Canadian Journal of Chemical Engineering*, 57, 433-443, 1979.
- [8] Gorog J.P., Adams T.N. and Brimacombe J.K. Regenerative Heat Transfer in Rotary Kilns, *Metallurgical Transactions B*, 13, 153-163, 1982.
- [9] Bui R.T., Tarasiewicz S. and Charette A. A Computer Model for the Cement Kiln. *IEEE Transactions on Industry Applications*, 4, 424-430, 1982.
- [10] Perron J. and Bui R.T. Rotary Cylinders: Solid Transport Prediction by Dimensional and Rheological Analysis, *The Canadian Journal of Chemical Engineering*, 68, 61-68, 1990.
- [11] Perron J., Nguyen H.T. and Bui R.T. Modélisation D'un four de Calcination du Coke de Pétrole: II. Simulation du Procédé, *The Canadian Journal of Chemical Engineering*, 70, 1120-1131, 1992.
- [12] Bui R.T., Perron J. and Read M. Model-based Optimization of the Operation of the Coke Calcining Kiln, *Carbon*, 31, 1139-1147, 1993.
- [13] Martins M.A., Oliveira L.S. and Franca A.S. Modeling and Simulation of Petroleum Coke Calcination in Rotary Kilns, *Fuel*, 80, 1611-1622, 2001.
- [14] Csernyei C. and Straatman A.G. Numerical Modeling of a Rotary Cement Kiln with Improvements to Shell Cooling, *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 102, 610-621, 2016.
- [15] Mujumdar K.S. and Ranade V.V. Simulation of Rotary Cement Kilns Using a One-Dimensional Model, *Chemical Engineering Research and Design*, 84, 165-177, 2006.
- [16] Elkanzi E.M., Marhoon F.S. and Jasim M.J. Rate-Based Simulation of Coke Calcination in Rotary Kilns, *Simultech*, 5-10, 2012.
- [17] Elkanzi E.M., Marhoon F.S. and Jasim M.J. Kinetic Analysis of the Coke Calcination Processes in Rotary Kilns, In: *Simulation and Modeling Methodologies, Technologies and Applications*, Springer, Cham, 45-54, 2014.
- [18] Bui R.T., Simard G., Charette A., Kocaefe Y. and Perron J. Mathematical Modeling of the Rotary Coke Calcining Kiln, *The Canadian Journal of Chemical Engineering*, 73, 534-545, 1995.
- [19] Atmaca A. and Yumrutaş R. Analysis of the Parameters Affecting Energy Consumption of a Rotary Kiln in Cement Industry, *Applied Thermal Engineering*, 66, 435-444, 2014.
- [20] Zhang Z. and Wang T. Simulation of Combustion and Thermal-Flow inside a Petroleum Coke Rotary Calcining Kiln: Part 2—Analysis of Effects of Tertiary Airflow and Rotation, In: *ASME International Mechanical Engineering Congress and Exposition*, 43765, 211-223, 2009.
- [21] Zhang Z. and Wang T. Simulation of Combustion and Thermal-Flow Inside a Petroleum Coke Rotary Calcining Kiln—Part I: Process Review and Modeling, *Journal of Thermal Science and Engineering Applications*, 2, 021006, 2010.
- [22] Ryan J., Bussmann M. and DeMartini N. CFD Modelling of Calcination in a Rotary Lime Kiln, *Processes*, 10, 1516, 2022.
- [23] Versteeg H.K. and Malalasekera W. *An Introduction to Computational Fluid Dynamics: The Finite Volume Method*, Pearson Education Limited, London, 2007.