



شبیه سازی عددی اثر مقدار گوگرد موجود در ذرات کنسانتره بر دمای شعله و تولید آلاینده های کوره فلش ذوب مس

ندا رجبی¹، محمد مقیمان^{2*}

1- دانشجوی کارشناسی ارشد، مهندسی مکانیک، دانشگاه فردوسی، مشهد

2- استاد، مهندسی مکانیک، دانشگاه فردوسی، مشهد

* مشهد، صندوق پستی 91775-1111، moghiman@um.ac.ir

اطلاعات مقاله

مقاله پژوهشی کامل

دریافت: 13 فروردین 1396

پذیرش: 05 خرداد 1396

ارائه در سایت: 22 تیر 1396

کلید واژگان:

گوگرد

کوره فلش

SO_x

NO_x

prepdf

چکیده

در این مطالعه شبیه سازی عددی کوره فلش ذوب مس، با هدف بررسی آلاینده های حاصل از احتراق کنسانتره های سولفیدی و سوخت کمکی انجام شد. این شبیه سازی با استفاده از روش اویلری برای فاز پیوسته جریان و روش لاگرانژی برای فاز گسسته ذرات صورت گرفته است. برای مدل سازی جریان احتراقی و اعمال اثرات آشفتنگی بر نرخ واکنش های شیمیایی از ترکیب مدل های تابع توزیع چگالی احتمال (pdf) و k-ε RNG استفاده شده است. با توجه به شرایط ترمودینامیکی کوره ذوب فلش، احتراق گوگرد موجود در ذرات کنسانتره به صورت انفجاری و با تشعشع زیاد صورت می گیرد. محاسبه اثرات انتقال حرارت تابشی با استفاده از مدل تشعشع مختصات گسسته (DOM) انجام شده است. نتایج شبیه سازی عددی نشان می دهد در شرایط احتراقی با هوای اضافی و در دماهای نسبتا بالا (>1273K) مقدار قابل توجهی از گوگرد به گاز SO₂ تبدیل و در نقاط سردتر بخشی از گاز SO₂ به SO₃ تبدیل می شود. در مناطقی از کوره که با کمبود اکسیژن همراه است، کسر جرمی گاز SO و نیز مقدار گوگرد نسوخته افزایش پیدا می کند. نتایج همچنین نشان می دهد با افزایش مقدار گوگرد موجود در ذرات کنسانتره به علت افزایش شدت تابش، بیشینه دمای کوره کاهش و کمینه دمای آن افزایش می یابد و در نتیجه توزیع دمای کوره یکنواخت تر می شود. این رفتار اثر زیادی بر کاهش انتشار آلاینده NO_x دارد.

Numerical simulation of the effect of existing sulfur in the concentrate particles on flame temperature and pollutants in the flash furnace copper smelting

Neda Rajabi, Mohammad Moghiman*

Department of Mechanical Engineering, Ferdowsi University, Mashhad, Iran.

* P.O.B. 91775-1111 Mashhad, Iran, moghiman@um.ac.ir

ARTICLE INFORMATION

Original Research Paper

Received 02 April 2017

Accepted 26 May 2017

Available Online 13 July 2017

Keywords:

Sulfur

Flash Furnace

SO_x

NO_x

prepdf

ABSTRACT

In this study numerical simulation of the flash furnace copper smelting was carried out to investigate the pollutants formation in combustion of sulfide concentrates and ancillary fuels. This simulation was done with use of Eulerian framework for continuous phase flow field and Lagrangian approach for discrete phase particles. For modeling of combustion flow and applying turbulence effects on the rate of chemical reactions the composition of Probability Density Function (PDF) and RNG, k-ε model were used. Due to the thermodynamic condition of flash smelting furnace, the combustion of sulfur which exists in concentrate particles, occurs explosively and with high radiation. To calculate the effect of radiative heat transfer the discrete ordinate method (DOM) was used. The numerical simulation results show, under combustion conditions with extra air and at partly high temperatures (>1273K) the only noteworthy sulfurous species are SO₂ and in colder points SO₂ is transformed to SO₃. In the points where there is not sufficient oxygen, the concentration of SO, and S₂ unburned are increased. The results also show, the maximum temperature is decreased with increase of existing sulfur in the concentrate particles and the minimum temperature is increased, because the radiation intensity is increased, so the furnace temperature is more uniform. This behavior has a significant influence on reduction of thermal NO_x emission.

1- مقدمه

کنسانتره سولفیدی که شامل مقدار زیادی گوگرد (S₂) و آهن (Fe) می باشد به شدت گرمناست بطوریکه که با افزایش درصد اکسیژن موجود در هوا کوره های ذوب فلش می توانند به صورت خودسوز گرمای لازم برای ذوب ذرات کنسانتره سولفیدی را تأمین کنند [4,3]. کوره ذوب فلش از سه بخش اصلی محفظه واکنش، ستلر و آفتیک تشکیل شده است. در شکل 1 نمایی از کوره ذوب فلش و بخش های اصلی آن نشان داده شده است [2,1].

ذوب فلش یک روش پیرومتالورژی¹ ذوب کنسانتره های سولفیدی است که امروزه به عنوان یک تکنولوژی غالب برای استخراج مس، مورد توجه قرار گرفته است. به طور کلی فرایند ذوب فلش بر پایه بهره گیری از گرمای واکنش اکسیداسیون کنسانتره های سولفیدی استوار است [2,1]. احتراق ذرات

¹ Pyro metallurgical

Please cite this article using:

N. Rajabi, M. Moghiman, Numerical simulation of the effect of existing sulfur in the concentrate particles on flame temperature and pollutants in the flash furnace copper smelting, *Modares Mechanical Engineering*, Vol. 17, No. 7, pp. 101-108, 2017 (in Persian)

برای ارجاع به این مقاله از عبارت ذیل استفاده نمایید:

www.stj.ir

بخش عمده آلاینده‌های کوره ذوب فلش را گوگرد دی‌اکسید (SO_2) و مقادیر کمی گوگرد تری‌اکسید (SO_3) و گوگرد منواکسید (SO) تشکیل می‌دهد. آلاینده‌های گوگردی اثرات جدی بر سلامتی انسان و اسیدی شدن محیط‌زیست دارند [9]. با این حال به حداقل رساندن مصرف سوخت‌های کمکی و جمع‌آوری کارآمد گوگرد دی‌اکسید حاصل برای تولید اسیدسولفوریک مهمترین انگیزه‌های استفاده از کوره ذوب فلش می‌باشند [10]. در این مطالعه احتراق جریان سه فازی هوا، ذرات کنسانتره سولفیدی و سوخت کمکی با استفاده از مدل احتراقی تعادل شیمیایی مدل‌سازی شده است. هدف از انجام این تحقیق بررسی خاصیت احتراقی گوگرد موجود در ذرات کنسانتره، که به صورت انفجاری و با تابش زیاد صورت می‌گیرد می‌باشد. اثر مقدار گوگرد موجود در ذرات کنسانتره بر توزیع دما و تغییر غلظت آلاینده‌ها مورد بررسی قرار گرفته است. در مطالعات سایر محققان، که با استفاده از مدل احتراقی مگنسن مدل‌سازی شده‌اند تنها گونه گوگردی محاسبه شده آلاینده SO_2 است. همچنین در این مطالعات نقش گوگرد موجود در ذرات کنسانتره و خاصیت احتراقی آن که با تابش زیاد منجر به یکنواخت‌تر شدن دمای کوره می‌گردد مورد توجه قرار نگرفته است. با توجه به اینکه بر خلاف مدل مگنسن مدل احتراقی تعادل شیمیایی قادر به محاسبه تعداد قابل توجهی گونه میانی حاصل از احتراق می‌باشد با بهره‌گیری از توانایی آن تمام آلاینده‌های حاصل از احتراق شامل SO_2 ، SO_3 و SO محاسبه شده‌اند. همچنین اثر مقدار گوگرد موجود در ذرات کنسانتره بر تولید آلاینده NO_x حرارتی نیز مورد مطالعه قرار گرفته است.

2- احتراق ذرات کنسانتره سولفیدی

شارژ کوره محتوی ذرات کنسانتره، جریان سیلیسی (کمک ذوب) و غبار بازگردانی همراه با جریان هوای پیش‌گرم شده از طریق مشعل‌های کنسانتره واقع در سقف محفظه واکنش، به داخل آن تزریق می‌شود (معمولاً مقدار کمی سوخت کمکی مانند گاز طبیعی و مازوت برای تأمین گرمای لازم برای شروع واکنش‌های احتراقی و حفظ دمای کوره در حالت استراحت استفاده می‌گردد) [4]. ذرات کنسانتره با حرکت در طی محفظه واکنش، با حرارت دریافتی از طریق انتقال حرارت جابجایی از فاز گاز، انتقال حرارت تابشی از دیواره‌ها و محیط و همچنین حرارت دریافتی از احتراق سوخت کمکی گرم می‌شوند [11,8]. مکانیزم واکنش‌های شیمیایی ذرات کنسانتره شامل دو مرحله تجزیه و اکسیداسیون است [4]. این واکنش‌ها با توجه به ترکیبات ذرات شارژ ورودی به کوره ذوب فلش متنوع‌اند. در جدول 1 ترکیب شارژ ورودی به کوره ذوب فلش مورد مطالعه نشان داده شده است [8].

با توجه به ترکیب شارژ ورودی ابتدا ترکیبات پیچیده کالکوپیریت و پیریتی به ترکیبات ساده‌تر سولفید آهن (FeS)، سولفید مس (Cu_2S) و گوگرد تجزیه می‌شوند. سپس گوگرد رها شده طی یک واکنش به شدت گرم‌آزا سریعاً به گوگرد دی‌اکسید تبدیل می‌شود [12].

بر اساس محاسبات تعادلی زمانی که گوگرد در دماهای بالا در تماس با

جدول 1 ترکیب مخلوط کنسانتره تغذیه شده به کوره [8]

درصد جرمی	نام ترکیب	نام ترکیب
50.3	CuFeS2	کالکوپیریت
20	FeS2	پیریت
4.6	Cu2S	کالکوسیت
24.5	Other	سایر

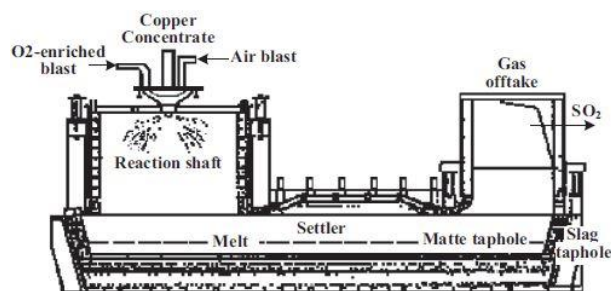


Fig. 1 Flash smelting furnace with its structure and material flows [1, 2]
شکل 1 ساختار کوره ذوب فلش و جریان‌های مواد [1, 2]

اطلاعات موجود درباره احتراق ذرات کنسانتره داخل کوره ذوب فلش با استفاده از مطالعات آزمایشگاهی، اندازه‌گیری‌ها و مدل‌سازی‌های فیزیکی و ریاضی حاصل شده‌اند. مطالعه در زمینه کوره ذوب فلش همواره با هدف کاهش میزان مصرف سوخت، آلاینده‌های زیست‌محیطی و افزایش سطح ایمنی عملکرد کوره‌ها مورد توجه بوده است [5].

در سال 2001 یورگنسن و همکارش که [4] طی آزمایشی اثر دمای هوا، ترکیب فاز گازی، زمان ماند و اندازه ذرات را بر میزان گوگرد باقی‌مانده در ذرات کنسانتره و سرعت واکنش‌ها مورد بررسی قرار دادند. آنها بیان کردند با افزایش دمای هوای ورودی و غلظت اکسیژن موجود در هوا، سرعت واکنش‌ها افزایش و میزان گوگرد باقی‌مانده در ذرات کنسانتره کاهش می‌یابد. همچنین اندازه ذرات نقش مؤثری بر زمان ماند ذرات در محفظه واکنش، زمان افزایش دمای ذرات و سرعت واکنش‌ها دارد. در سال 2002 ژینگ فنگ لی و همکاران [6] جریان سیال، انتقال حرارت و احتراق کوره فلش را با در نظر گرفتن محفظه واکنش و ناحیه ستلر مدل‌سازی کردند. این مدل‌سازی با استفاده از روش اویلری برای جریان گاز و روش لاگرانژی برای ذرات کنسانتره انجام شد. از جمله نتایج این مدل‌سازی می‌توان به بررسی توزیع جریان، دما، غلظت گونه‌های SO_2 و O_2 و مسیر حرکت ذرات اشاره کرد. با توجه به استفاده از مدل احتراقی مگنسن، در پژوهش ژینگ فنگ لی و همکاران سایر آلاینده‌های گوگردی (SO_3 ، SO) مورد بررسی قرار نگرفته‌اند. در سال 2014 جان‌ژو و همکاران [7] به بررسی اثر نسبت مومنتم جریان هوا بر توزیع ذرات و احتراق کوره ذوب فلش پرداختند. آنها بیان کردند افزایش نسبت مومنتم منجر به افزایش میزان پخش جریان گازی و ذرات می‌شود. گروهی از ذرات هم‌جهت با جریان گازی حرکت می‌کنند اما ذرات بزرگتر از مسیر حرکت جریان گازی خارج می‌شوند. همچنین ممکن است ذرات ریز در نواحی جریان برگشتی به دام افتند. افزایش نسبت مومنتم باعث شروع زودتر واکنش احتراق شده است. در تحقیق جان ژو و همکاران صرفاً به بررسی اثر مومنتم پرداخته شده است و آلاینده‌های گوگردی (SO_3 ، SO_2 ، SO) حاصل از احتراق مورد مطالعه قرار نگرفته‌اند. در سال 2015 حسن زعیم و منصور [8] به شبیه‌سازی شرایط کارکرد کوره ذوب فلش خاتون‌آباد پرداختند. این شبیه‌سازی برای سه فاز گاز، ذرات کنسانتره و سوخت کمکی مازوت انجام شده است. آنها گزارش کردند تغییرات دما در نواحی بالای محفظه واکنش شدید و در نواحی پایین به صورت یکنواخت است. دمای دیواره محفظه واکنش در جهت محوری از بالا به پایین افزایش می‌یابد و حداکثر دما نیز در نزدیک شعله مازوت مشاهده شده است. در این نقاط کسر جرمی اکسیژن بسیار کم بوده و ذرات با حرارت دریافتی از شعله مازوت بدون انجام هیچ واکنش اکسیداسیونی ذوب می‌شوند. در تحقیق حسن زعیم و منصور به بررسی آلاینده‌های گوگردی کوره ذوب فلش پرداخته نشده است.

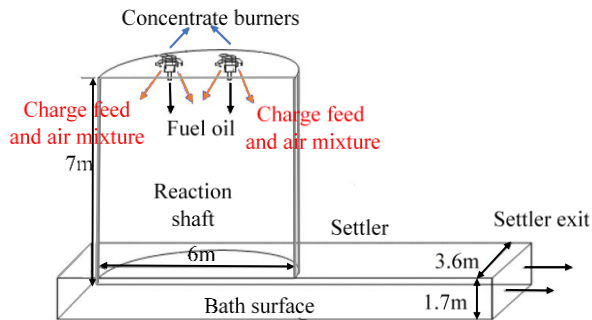


Fig. 3 Schematic diagram of furnace geometry

شکل 3 نمایی از هندسه کوره

محیط محاسباتی شامل 83015 سلول و 36269 گره محاسباتی است. با افزایش تعداد گره های محاسباتی نتایج کمتر از 10٪ تغییر کرده اند. در نواحی نزدیک مشعل کنسانتره از شبکه ریزتر و در نواحی پایین محفظه واکنش از شبکه با تراکم کمتری استفاده شده است. در شکل 4 نمایی از شبکه محاسباتی مورد استفاده در محیط حل نشان داده شده است.

جریان سه فازی هوا، ذرات جامد شارژ و قطرات سوخت مازوت با استفاده از روش اولبری برای فاز پیوسته جریان و روش لاگرانژی برای ذرات جامد شارژ و قطرات مایع مدل سازی شده است. جهت مدل سازی جریان آشفته از مدل RNG, k-ε و برای اعمال اثرات آشفتنگی بر نرخ واکنش های شیمیایی از مدل تابع توزیع چگالی احتمال (pdf) استفاده شده است. واکنش های تجزیه گونه های پایدار، تأثیر قابل توجهی بر کاهش دمای شعله دارند. با استفاده از

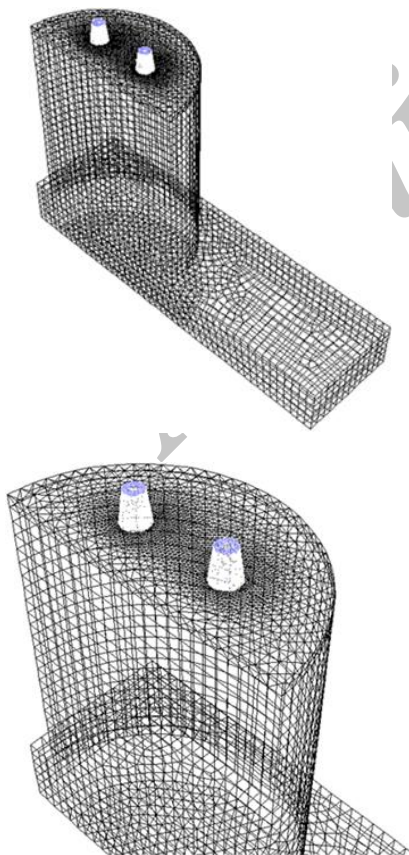
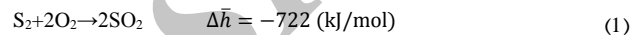


Fig. 4 Three-dimensional grid of flash smelting furnace

شکل 4 شبکه سه بعدی کوره ذوب فلش

اکسیژن قرار می گیرد در شرایط غنی از اکسیژن مقدار قابل توجهی گوگرد دی اکسید و مقادیر ناچیزی گوگرد تری اکسید و گوگرد منواکسید حاصل می شود. در یک کوره احتراقی زغال سنگ در نواحی که دمای جریان گازی محصولات احتراقی کاهش می یابد در اثر واکنش گوگرد دی اکسید با اکسیژن اضافی موجود، غلظت گوگرد تری اکسید افزایش می یابد [13]. بیشتر مطالعات برای درک مکانیزم احتراق گوگرد بر احتراق H_2S متمرکز بوده اند. در شکل 2 منحنی مربوط به حدود انفجار H_2S-O_2 نشان داده شده است. این منحنی نواحی احتراق سریع (انفجاری) و آهسته را نشان می دهد [14]. با توجه به شکل 2 و شرایط ترمودینامیکی کوره ذوب فلش واکنش احتراق گوگرد در این کوره به صورت انفجاری صورت می گیرد.

واکنش های اصلی کوره ذوب فلش مطابق جدول 2 انجام می شوند. ابتدا ذرات با حرارت دریافتی از محیط گازی و دیواره ها تا دمای تجزیه ترکیبات سولفیدی (500K) گرم می شوند. در این دما واکنش های تجزیه کالکوپیریت و پیریت رخ می دهند. همزمان با واکنش های تجزیه، گوگرد آزاد شده از تجزیه ترکیبات سولفیدی مطابق رابطه (1) با اکسیژن واکنش می دهد و گرمای زیادی آزاد می کند. وقتی که دما به 800K می رسد سایر واکنش های اکسیداسیون اتفاق می افتند [11,8].



3- مدل سازی ریاضی

کوره ای که در این مقاله مورد بررسی قرار گرفته است دارای ظرفیت 46 تن بر ساعت کنسانتره سولفیدی است. ارتفاع و قطر محفظه واکنش به ترتیب 7 و 6 متر است. با توجه به اینکه محفظه واکنش و ناحیه ستلر در ساختار به صورت متقارن هستند فقط نیمی از کوره به عنوان محیط حل در نظر گرفته شده است. در شکل 3 هندسه و بخش های مختلف کوره نشان داده شده است.

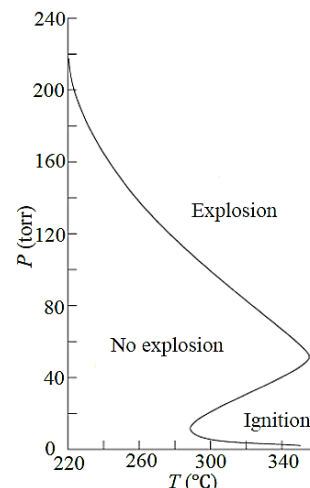


Fig. 2 Approximate explosion limits of a stoichiometric H_2S-O_2 mixture [14]

شکل 2 تقریبی از حدود انفجار مخلوط استوکیومتریک H_2S-O_2 [14]

جدول 2 واکنش های شیمیایی فرایند ذوب فلش برای انجام شبیه سازی [8]

Table 2 Chemical reactions to simulate the flash smelting process [8]

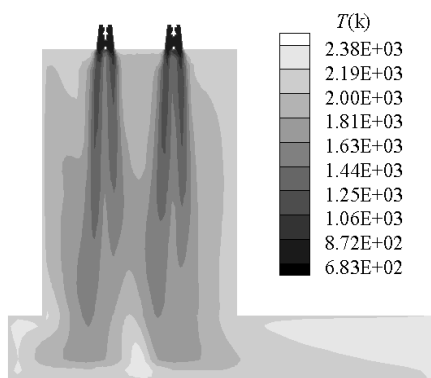
واکنش	نوع واکنش
$CuFeS_2 \rightarrow 0.5Cu_2S + FeS + 0.25S_2$	تجزیه ($T=500K$)
$FeS_2 \rightarrow FeS + 0.5S_2$	
$FeS + 1.5O_2 \rightarrow FeO + SO_2$	اکسیداسیون ($T > 800K$)
$Cu_2S + O_2 \rightarrow 2Cu + SO_2$	

مقادیر کسر جرمی گونه ها، چگالی و دما برحسب مقادیر مختلف \bar{f} و \bar{f}'^2 و \bar{H}^* در جداول مشخصی ذخیره شده و در حین حل عددی از آنها استفاده می شود. مقادیر این کمیت ها در طی حل اصلاح و بروز رسانی می شوند [17,16].

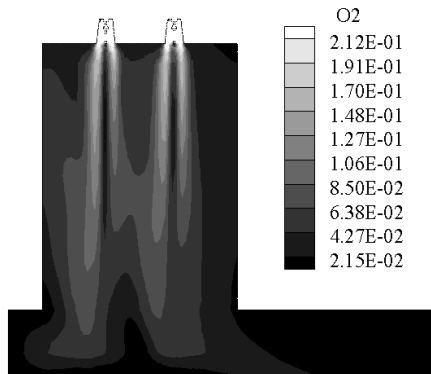
4- نتایج و بحث

4-1- نتایج شبیه سازی عددی

در شکل 5 توزیع دما و گونه های احتراقی حاصل از کوره ذوب فلش نشان داده شده است. با توجه به شکل 5 دما در نواحی مشعل کنسانتره که محل عبور ذرات کنسانتره است و گرما صرف افزایش دمای ذرات می گردد، کمترین مقادیر را دارد. در شرایط احتراقی با وجود هوای اضافی و در دماهای نسبتاً بالا ($>1273K$) مقدار زیادی از گوگرد به SO_2 تبدیل و در نقاط سردتر بخشی از SO_2 با O_2 واکنش داده و به SO_3 تبدیل می شود. در مناطقی از کوره که با کمبود اکسیژن همراه است کسر جرمی SO و نیز مقدار گوگرد نسوخته افزایش می یابد. در نواحی مشعل کنسانتره، غلظت اکسیژن بیشترین مقدار را دارد زیرا در این نواحی همان طور که بیان شد گرم شدن ذرات صورت می گیرد و واکنش های احتراقی محدود هستند. غلظت آلاینده NO_x حرارتی در دماهای بالا افزایش یافته است.



(الف)



(ب)

مدل تعادل شیمیایی که توانایی محاسبه تعداد زیادی گونه محصول را دارد تعداد 60 گونه حاصل از این واکنش ها محاسبه شده اند. تابش حرارتی نیز نقش مؤثری در توزیع یکنواخت دما دارد. به طوری که دمای مناطق داغ تر کاهش و دمای مناطق سرد افزایش پیدا می کند. این پدیده نقش مؤثری بر کاهش آلاینده NO_x حرارتی دارد. اثر انتقال حرارت تابشی توسط مدل تابشی مختصات گسسته (DOM) مورد بررسی قرار گرفته است.

در مدل تعادل شیمیایی با فرض اینکه سرعت واکنش ها بسیار بالا است با ورود جداگانه سوخت و هوا به محفظه واکنش یک مخلوط تعادلی بین سوخت، اکسیدکننده و محصولات واکنش ایجاد می شود. پارامترهای دما، کسرگونه ها و چگالی با کمینه کردن انرژی آزاد گیبس مخلوط حاصل محاسبه می گردند. در این مدل با وجود اتلاف حرارتی، حالت ترموشیمیایی مخلوط حاصل تابعی از آنتالپی و کمیتی به نام کسر مخلوط (f) است. معادلات بقاء برای هر گونه شیمیایی به طور مجزا حل نمی شود، بلکه صرفاً معادلات بقاء برای کسر مخلوط، واریانس کسر مخلوط (\bar{f}'^2) و آنتالپی \bar{H}^* حل می گردد. کسر مخلوط، واریانس آن و آنتالپی از طریق معادلات بقاء (2) تا (4) محاسبه می شوند [15]:

$$\frac{\partial}{\partial x_i}(\rho u_i \bar{f}) = \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\frac{\mu_t}{\sigma_t} \frac{\partial \bar{f}}{\partial x_i} \right) + S_m \quad (2)$$

$$\frac{\partial}{\partial x_i}(\rho u_i \bar{f}'^2) = \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\frac{\mu_t}{\sigma_t} \frac{\partial \bar{f}'^2}{\partial x_i} \right) + C_g \mu_t \left(\frac{\partial \bar{f}}{\partial x_i} \right)^2 \quad (3)$$

$$\frac{\partial}{\partial x_i}(\rho u_i \bar{H}^*) = \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\frac{k_t}{c_p} \frac{\partial \bar{H}^*}{\partial x_i} \right) + S_h \quad (4)$$

آنتالپی لحظه ای \bar{H}^* از طریق رابطه (5) محاسبه می شود:

$$\bar{H}^* = \sum_j m_j H_j = \sum_j m_j \left[\int_{T_{ref,j}}^T c_{p,j} dT + h_j^0(T_{ref,j}) \right] \quad (5)$$

همان طور که بیان شد برای اعمال اثرات آشفتنی بر نرخ واکنش های شیمیایی از مدل تابع چگالی احتمال استفاده شده است. تابع توزیع چگالی احتمال که با $p(f)$ نشان داده می شود، به عنوان یک تابع وزنی در محاسبات وارد می شود. این تابع توصیف کننده نوسانات لحظه ای کمیت f در جریان آشفته است. از آن به عنوان کسری از زمان که سیال خاصیت f را دارد، استفاده می گردد. شکل تابع $p(f)$ به طبیعت اغتشاشات متغیر f در جریان آشفته وابسته است. در جریان های واقعی توزیع $p(f)$ مشخص نمی باشد، به همین دلیل در روش تابع چگالی احتمال با توزیع فرضی، بر اساس مشاهدات تجربی یک تابع ریاضی برای $p(f)$ در نظر گرفته می شود که تقریبی از شکل واقعی آن است [15]. در تحقیق حاضر از تابع توزیع چگالی احتمال β که مقادیر متوسط کسر جرمی گونه ها، دما و چگالی مخلوط را به واریانس کسر مخلوط ارتباط می دهد استفاده شده است. شکل تابع β به صورت رابطه (6) که تابعی f و \bar{f}'^2 است محاسبه می شود [16].

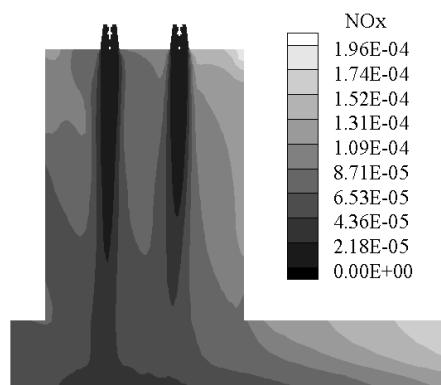
$$p(f) = \frac{f^{\alpha-1}(1-f)^{\beta-1}}{\int f^{\alpha-1}(1-f)^{\beta-1} df} \quad (6-الف)$$

$$\alpha = \bar{f} \left[\frac{\bar{f}(1-\bar{f})}{\bar{f}'^2} - 1 \right] \quad (6-ب)$$

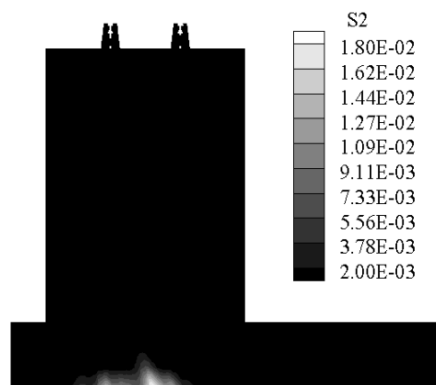
$$\beta = (1-\bar{f}) \left[\frac{\bar{f}(1-\bar{f})}{\bar{f}'^2} - 1 \right]$$

در صورت وجود جریان ثانویه در یک سیستم غیرآدیباتیک، چگالی، دما و کسر جرمی متوسط گیری شده با توجه به رابطه (7) محاسبه می شوند [15]:

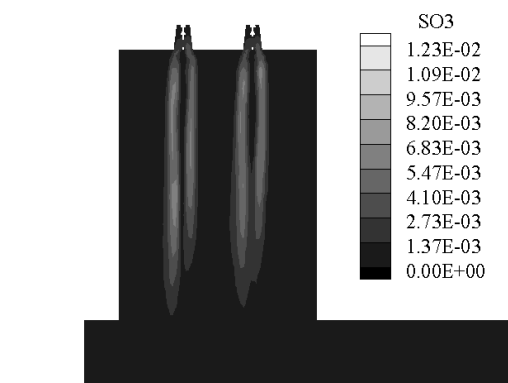
$$\bar{\phi}_i = \int_0^1 \int_0^1 p_1(f_{fuel}) p_2(p_{sec}) \phi_i(f_{fuel}, p_{sec}, \bar{H}) df_{fuel} dp_{sec} \quad (7)$$



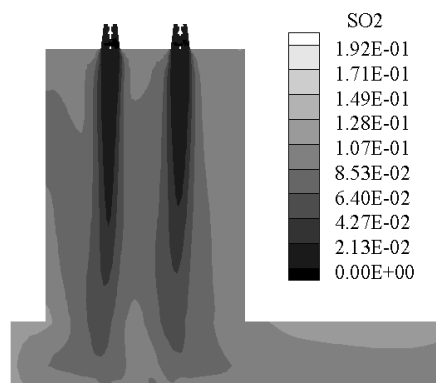
(و)



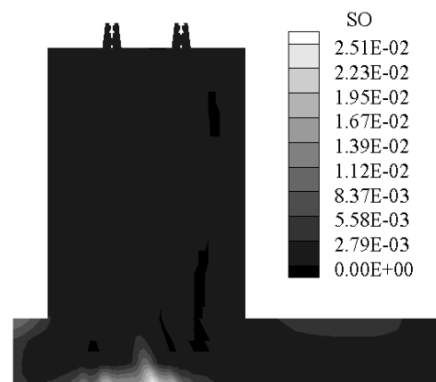
(ج)



(د)



(ه)



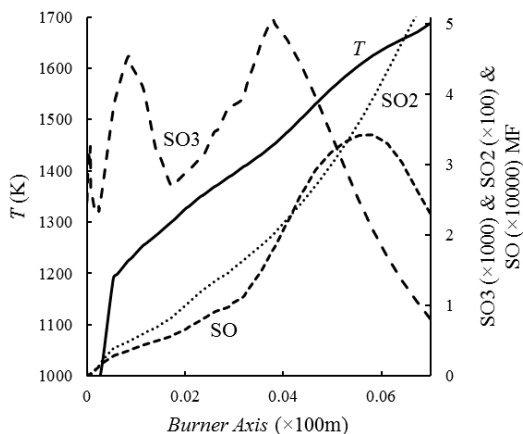
(ی)

Fig. 5 Temperature and combustion species distribution at flash furnace

شکل 5 توزیع دما و گونه های احتراقی در کوره فلش

در شکل 6 به ترتیب نمودار اثر تغییرات دما، غلظت O_2 و غلظت S_2 بر تغییر کسر جرمی آلاینده های گوگردی SO ، SO_2 و SO_3 در محور گذرنده از مشعل کنسانتره نشان داده شده است. با توجه به شکل 6 کسر جرمی SO_3 در نواحی بالای محور مشعل کنسانتره دو مرحله افزایش و یک مرحله کاهش را طی می کند و از فاصله 4 متر به بعد دچار افت شدید می شود. کاهش کسر جرمی O_2 و افزایش غلظت SO_2 و همچنین تشکیل سایر گونه ها مانند SO بر تغییرات کسر جرمی SO_3 اثرگذار هستند. با توجه به اینکه SO_3 در نواحی سردتر در اثر واکنش SO_2 با اکسیژن هوای اضافی تولید می شود در فاصله 4 متری به بعد از محور مشعل کنسانتره با افزایش دما کسر جرمی SO_3 کاهش می یابد. کسر جرمی SO_2 از ابتدا تا انتهای محور مشعل کنسانتره با افزایش دما، افزایش پیدا می کند. در شرایط غنی از اکسیژن و در دماهای نسبتا بالا ($>1273K$) محصول اصلی احتراق گوگرد، SO_2 است. کسر جرمی SO نیز ابتدا دچار افزایش می شود و از فاصله 5.5 متر به بعد یک مسیر کاهشی را طی می کند. آلاینده SO در نقاطی که کمبود اکسیژن وجود دارد در اثر احتراق ناقص گوگرد ایجاد می شود. غلظت SO و غلظت S_2 نسوخته با افزایش کسر جرمی اکسیژن کاهش می یابند.

در شکل 7 اثر مقدار گوگرد موجود در ذرات کنسانتره بر توزیع دمای کوره فلش نشان داده شده است. با توجه به شکل 7 با افزایش کسر جرمی گوگرد، توزیع دمای یکنواخت تری در کوره فلش ایجاد شده است. در شکل 8



(الف)

اتوکمپو مقایسه شده اند. برای انجام شبیه سازی از شرایط واقعی کوره آزمایشگاهی استفاده شده است (جدول 3) [18]. مخلوط کنسانتره و جریان هوا از طریق دهانه ورودی به داخل کوره که به شکل یک استوانه عمودی است تزریق می شوند. در شکل 10 نمایی از هندسه و شبکه بندی کوره نشان داده شده است. محیط حل از 20835 گره محاسباتی تشکیل شده است. با توجه به تغییرات شدید در نواحی بالای کوره، در این نقاط از شبکه با تراکم بیشتر استفاده شده است.

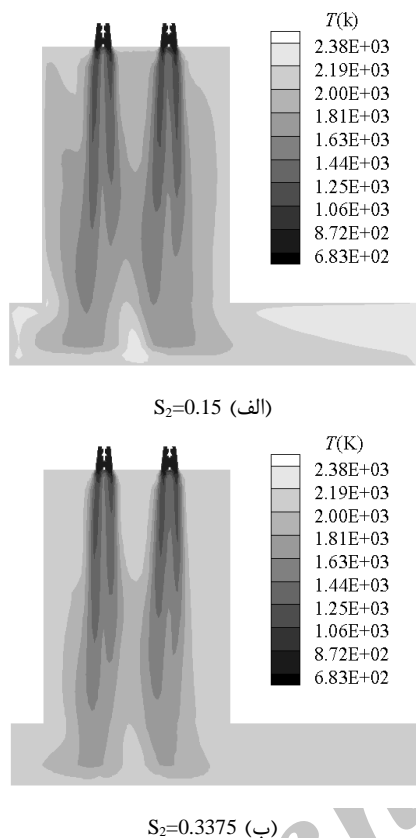


Fig. 7 The effect of existing sulfur in the concentrate particles on temperature distribution

شکل 7 اثر مقدار گوگرد موجود در ذرات کنسانتره بر توزیع دما

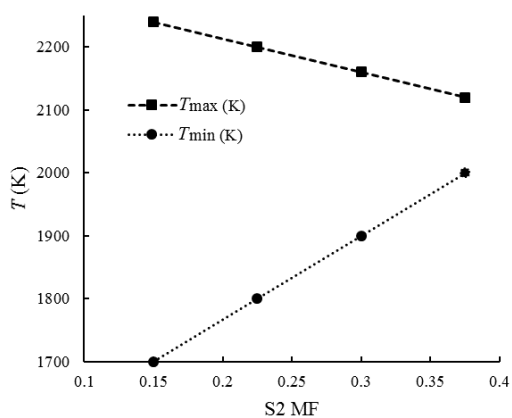


Fig. 8 The effect of existing sulfur in the concentrate particles on maximum and minimum temperature within shaft

شکل 8 اثر مقدار گوگرد موجود در ذرات کنسانتره بر بیشینه و کمینه دما در محفظه واکنش

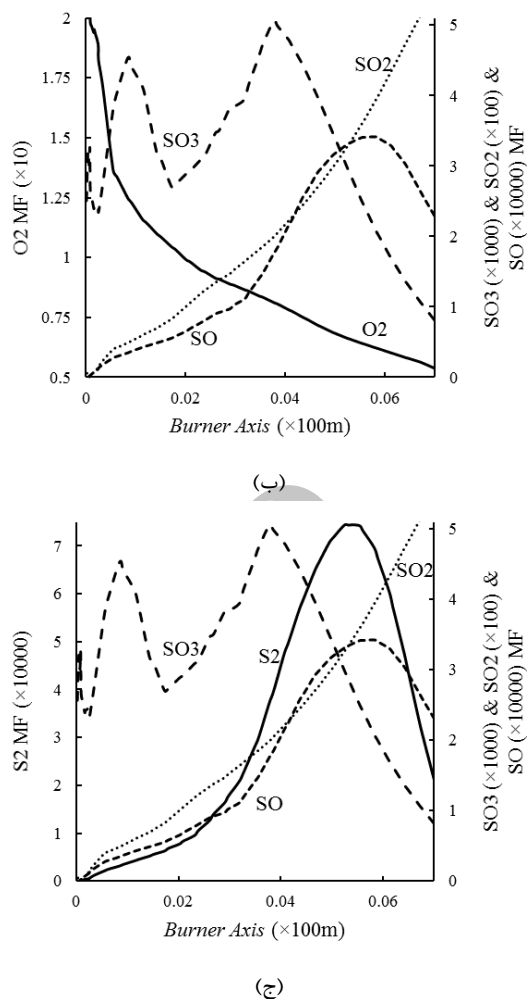


Fig. 6 Effect of temperature and O₂ and S₂ concentration on SO_x pollutants formation

شکل 6 اثر دما و غلظت O₂ و S₂ بر تولید آلاینده های SO_x

نیز اثر مقدار گوگرد موجود در ذرات کنسانتره بر کمینه و بیشینه دما، در محفظه واکنش نشان داده شده است. با توجه به شکل 8 مشخص است که افزایش مقدار گوگرد موجود در ذرات کنسانتره باعث افزایش کمینه دمای کوره و کاهش بیشینه دما شده است. احتراق گوگرد موجود در ذرات کنسانتره در کوره ذوب فلش به صورت انفجاری و با تابش زیادی رخ می دهد؛ این رفتار باعث کاهش دمای نقاط داغ و افزایش دما در نقاط سردتر می گردد. در نتیجه با افزایش مقدار گوگرد موجود در ذرات کنسانتره توزیع دمای کوره یکنواخت تر می گردد.

در شکل 9 اثر مقدار گوگرد موجود در ذرات کنسانتره بر بیشترین مقدار حرارتی نشان داده شده است. با توجه به شکل 9 با افزایش کسر جرمی گوگرد موجود در ذرات کنسانتره مقدار بیشترین NO_x حرارتی کاهش می یابد. زیرا همان طور که بیان شد با افزایش گوگرد موجود در ذرات کنسانتره بیشینه دمای کوره کاهش پیدا می کند. در نتیجه احتراق گوگرد که با تابش زیادی صورت می گیرد اثر قابل توجهی بر کاهش NO_x حرارتی دارد.

2-4- اعتبار سنجی

برای ارزیابی صحت مدل سازی ریاضی انجام شده در کار حاضر، نتایج حاصل از شبیه سازی عددی با مقادیر اندازه گیری شده کوره آزمایشگاهی شرکت

حاصل از شبیه سازی عددی با مقادیر اندازه گیری تطابق مناسبی را نشان می دهد.

با توجه به شکل 12 در شروع احتراق و مصرف اکسیژن ورودی در امتداد محور کوره بتدریج کسر جرمی آن کاهش می یابد تا در نهایت به صفر می رسد. کسر جرمی SO_2 نیز در امتداد محور مرکزی کوره تا رسیدن به مقدار ثابتی افزایش پیدا می کند. مقایسه نتایج حاصل از شبیه سازی عددی و مقادیر اندازه گیری غلظت گونه های SO_2 و O_2 تطابق مناسبی را نشان می دهد.

5- نتیجه گیری

در این مطالعه کوره فلش کارخانه ذوب مس با هدف بررسی اثر خاصیت احتراق انفجاری گوگرد بر دمای شعله و آلاینده های تولیدی مورد مطالعه قرار گرفت. نتایج حاصل از شبیه سازی عددی نشان داد در شرایط غنی از اکسیژن و در دماهای بالا ($>1273K$) محصول اصلی احتراق گوگرد به صورت SO_2 ظاهر می شود. در کوره فلش در ناحیه مشعل کنسانتره که دما نسبتاً پایین است و اکسیژن اضافی وجود دارد، SO_3 در اثر اکسیداسیون SO_2 تشکیل می شود. زمانی که اکسیژن کافی برای احتراق گوگرد در دسترس نیست کسر جرمی SO و گوگرد نسوخته افزایش پیدا می کند. با افزایش مقدار گوگرد موجود در ذرات کنسانتره، بیشینه دمای کوره کاهش و کمینه دما افزایش یافته می یابد و توزیع دمای یکنواخت تری در کوره ایجاد می شود. این رفتار اثر زیادی بر کاهش انتشار NO_x حرارتی دارد.

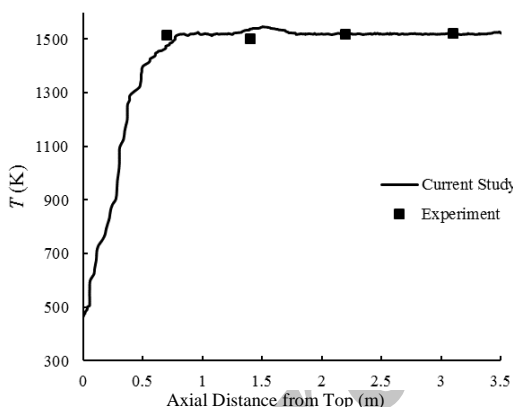


Fig. 11 Comparison between the predicted and measured temperature

شکل 11 مقایسه دمای پیش بینی شده و اندازه گیری شده

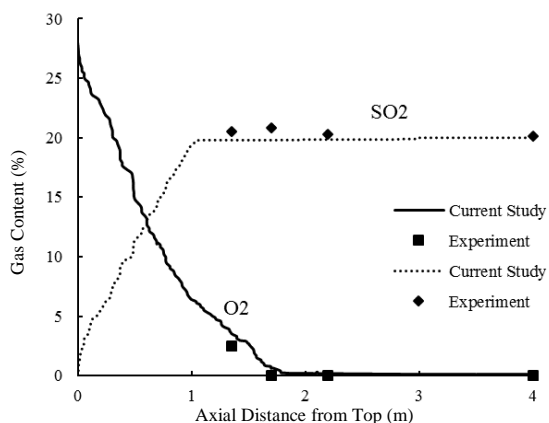


Fig. 12 Comparison between the predicted and measured SO_2 and O_2 concentration

شکل 12 مقایسه غلظت SO_2 و O_2 پیش بینی شده و اندازه گیری شده

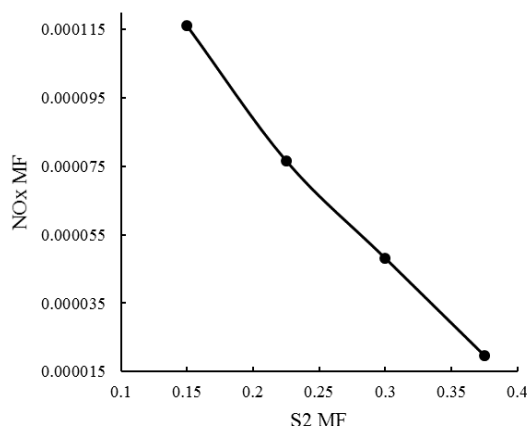


Fig. 9 The effect of existing sulfur in the concentrate particles on NO_x formation

شکل 9 اثر مقدار گوگرد موجود در ذرات کنسانتره بر تولید NO_x حرارتی

جدول 3 شرایط مرزی کوره فلش آزمایشی اتوکمپو [18]

Table 3 Boundary Conditions for an Outokumpu Pilot Flash Furnace [18]

882Nm ³ /h	دبی هوای ورودی
463K	دمای هوای ورودی
28%	اکسیژن موجود در هوا
960kg/h	دبی کنسانتره ورودی
Cu=18.1 Fe=35.8 S=35.5 SiO ₂ =5	ترکیب شیمیایی کنسانتره ورودی
50 μm	اندازه ذرات کنسانتره
4300 kg/m ³	چگالی ذرات کنسانتره
1473K	دمای دیواره های کوره

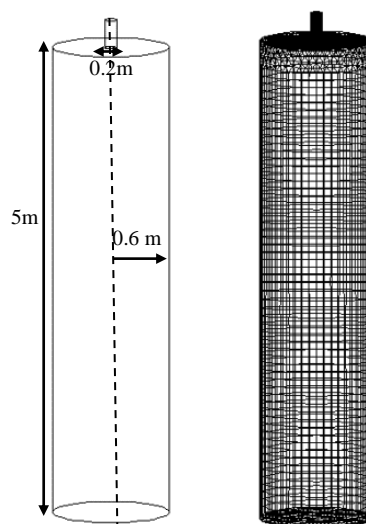


Fig. 10 Geometry diagram and three-dimensional grid of an Outokumpu Pilot Flash Furnace

شکل 10 هندسه و شبکه بندی سه بعدی از کوره فلش آزمایشی اتوکمپو

در شکل های 11 و 12 نتایج شبیه سازی عددی و نتایج اندازه گیری آزمایشگاهی به ترتیب برای تغییرات دما و تغییر غلظت گونه های O_2 و SO_2 در محور مرکزی کوره نشان داده شده است. در شکل 11 مشاهده می شود که در نواحی ورودی کوره با ورود واکنش دهنده های سرد دما بتدریج افزایش می یابد تا به یک مقدار نسبتاً ثابتی در امتداد محور کوره برسد. مقایسه نتایج

6- فهرست علائم

عدد ثابت	C_d
عدد ثابت	C_g
ظرفیت گرمایی ویژه (kJ/kg-K)	c_p
کسر مخلوط	f
واریانس کسر مخلوط	f'
آنتالپی واکنش (J/kg)	H
آنتالپی تشکیل گونه ز در دمای مینا (J/kg)	$h_j^0(T_{ref,j})$
انرژی جنبشی تلاطمی (m^2/s^2)	k
هدایت حرارتی (W/m-K)	k_t
کسر جرمی گونه ز	m_j
کسر مخلوط بی بعد جریان ثانویه	p_{sec}
جمله چشمه ناشی از انتقال حرارت	S_h
جمله چشمه ناشی از انتقال جرم	S_m
دما (K)	T
سرعت (m/s)	u
علائم یونانی	
آنتالپی واکنش ($kJmol^{-1}$)	$\Delta \bar{h}$
نرخ اتلاف تلاطمی (m^2/s^3)	ε
لزجت گردابه‌ای (kg/(m.s))	μ_t
چگالی (kg/m^3)	ρ
عدد ثابت	σ_t

7- مراجع

- [5] J. Vaarno, J. Jarvi, T. Ahokainen, T. Laurila, P. Taskinen, Development of a mathematical model of flash smelting and converting processes, *Third International Conference on CFD in the Minerals and Process Industries, Melbourne, Australia*, pp. 147-154, 10-12, 2003.
- [6] C. M. Xinfeng Li, T. Xiao, Numerical modeling of Jinlong CJD burner copper flash smelting furnace, *Journal of University of Science and Technology Beijing*, Vol. 6, No. 6, pp. 417-421, 2002.
- [7] J. Z. Juz, Z. Chen, Y. Mao, Influence analysis of air flow momentum on concentrate dispersion and combustion in copper flash smelting furnace by cfd simulation, *The Minerals, Metals & Materials Society*, Vol. 66, No. 9, pp. 1629-1637, 2014.
- [8] E. H. Zaim, S. H. Mansouri, A new mathematical model for copper concentrate combustion in flash smelting furnaces, *Proceedings of the Institution of Mechanical Engineers, Part E: Journal of Process Mechanical Engineering*, Vol. 231, No. 2, pp. 119-130, 2015.
- [9] P. Gaudin, S. Dorge, H. Nouali, J. Patarin, J. F. Brillhac, E. Fiani, M. Vierling, M. Molière, Synthesis of CuO/SBA-15 adsorbents for SO_x removal applications, using different impregnation methods, *Comptes Rendus Chimie*, Vol. 18, No. 10, pp. 1013-1029, 2015.
- [10] R. Moskalyk, A. Alfantazi, Review of copper pyrometallurgical practice: today and tomorrow, *Minerals Engineering*, Vol. 16, No. 10, pp. 893-919, 2003.
- [11] C. B. Solnordal, F. R. Jorgensen, P. T. Koh, A. Hunt, CFD modelling of the flow and reactions in the Olympic Dam flash furnace smelter reaction shaft, *Applied Mathematical Modelling*, Vol. 30, No. 11, pp. 1310-1325, 2006.
- [12] H. Müller, Sulfuric acid and sulfur trioxide, *Ullmann's Encyclopedia of Industrial Chemistry*, Vol. 25, pp. 635-703, 1994.
- [13] D. Fleig, K. Andersson, F. Normann, F. Johnsson, SO₃ formation under oxyfuel combustion conditions, *Industrial & Engineering Chemistry Research*, Vol. 50, No. 14, pp. 8505-8514, 2011.
- [14] G. Irvin, Y. Richard, Combustion, *Academic Press is an Important of Elsevier*, 2008.
- [15] A. Inc., Ansys Fluent 14 theory guide, 2011.
- [16] M. Moghiman, S. Javadi, A. Moghiman, S. B. Hosseini, A numerical study on thermal dissociation of H₂S, *World Academy of Science, Engineering and Technology, International Journal of Mechanical, Aerospace, Industrial, Mechatronic and Manufacturing Engineering*, Vol. 4, No. 2, pp. 244-249, 2010.
- [17] M. Javadi, M. Moghiman, Hydrogen and carbon black production from thermal decomposition of sub-quality natural gas, *International Journal of Spray and Combustion Dynamics*, Vol. 2, No. 1, pp. 85-101, 2010.
- [18] Y. Hahn, H. Y. Sohn, Mathematical modeling of sulfide flash smelting process: Part I. Model development and verification with laboratory and pilot plant measurements for chalcopyrite concentrate smelting, *Metallurgical Transactions B*, Vol. 21, No. 6, pp. 945-958, 1990.
- [1] Y. F. Xie, J. H. Liu, D. G. Xu, W. H. Gui, C. H. Yang, Optimal control strategy of working condition transition for copper flash smelting process, *Control Engineering Practice*, Vol. 46, pp. 66-76, 2016.
- [2] J. H. Liu, W. H. Gui, Y. F. Xie, C. H. Yang, Dynamic modeling of copper flash smelting process at a smelter in china, *Applied Mathematical Modelling*, Vol. 38, No. 7, pp. 2206-2213, 2014.
- [3] D. Higgins, N. Gray, M. Davidson, Simulating particle agglomeration in the flash smelting reaction shaft, *Minerals Engineering*, Vol. 22, No. 14, pp. 1251-1265, 2009.
- [4] F. Jorgensen, P. Koh, Combustion in flash smelting furnaces, *JOM*, Vol. 53, No. 5, pp. 16-20, 2001.