球团焙烧过程工艺模拟研究及应用
——料层热质传输模型

储太山
(中冶长天国际工程有限责任公司,湖南 长沙 410007)

摘要: 为了进一步探明球团焙烧过程中料层内部的热质传输特征以及反应进程,本文基于质量与热量传输定律,建立包括静止料层和滚动料层的热质传输模型,并对料层中发生的水分蒸发、磁铁矿与硫的氧化、结晶水及碳酸盐的分解、固定碳燃烧等物理化学现象分别建立动力学模型。结果表明:利用嵌入了反应动力学模型的静料层热质传输模型可以较好地模拟链算机、环冷机和带式焙烧机等静料层的焙烧过程,利用嵌入了反应动力学模型、物料运动和燃烧模型的回转窑一维传热模型可以较真实地模拟回转窑内滚动料层的传热过程。

关键词: 静止料层; 滚动料层; 热质传输; 反应动力学; 模型
中图分类号: TF046.6 **文献标识码:** A **文章编号:** 1000-8764(2023)02-0061-11
doi: 10.13403/j.sjqt.2023.02.024

Research and application of simulation for roasting process of pellets
—— Heat-mass transfer model of material bed

CHU Taishan
(Zhongye Changtian International Engineering Co.,Ltd.,Changsha 410205,Hunan,China)

Abstract: In order to further explore the heat-mass transport characteristics and reaction process inside the material bed during the roasting process of pellets,a heat-mass transfer model including static material bed and rolling material bed are established based on the law of heat-mass transfer,and the kinetic models of such physical and chemical phenomena as water evaporation,oxidation of magnetite and sulfur,decomposition of crystalline water and carbonate,and combustion of fixed carbon in the material beds are established. The results show that the heat-mass transfer model of the static material bed embedded with the reaction kinetic model can better simulate the roasting process of the static material bed in chain grate,ring cooler and belt roaster,and the one-dimensional heat transfer model of the rotary kiln embedded with the reaction kinetic model,material movement and combustion model can simulate the heat transfer process of the rolling material bed in the rotary kiln more realistically.

Key words: static material bed; rolling material bed; heat-mass transfer; reaction kinetics; model

在传统的高炉—转炉钢铁冶炼流程中,球团矿作为优质的炼铁原料,其生产过程能耗低、CO_2排放量低(仅为烧结矿的30%~35%)。因此,大幅提高球团矿入炉比是钢铁业实现绿色低碳冶炼的重要途经。据统计,我国每年的球团矿产能已达约2.4亿吨[1]。近年来,由于绿色低碳政策的大力推行,一大批大规模球团厂已相继建成投产。研究球团焙烧过程中料层内部复杂的热质交换机理,有助于从微观视角查明球团料层的变化情况及其影响因素,从而为优化工艺、实现节能降耗奠定基础。国内在焙烧过程数值模拟方面的大部分研究还停留在机理研究和热质平衡分析阶

收稿日期: 2022-12-01; **修回日期:** 2022-12-22
作者简介: 储太山(1966—),男,正高级工程师,从事铁矿烧结球团工艺设计及相关技术研究。

(C)1994-2023 China Academic Journal Electronic Publishing House. All rights reserved. http://www.cnki.net

段[2-3]，如范晓慧[4]详细论述了球团生产过程数学模型并建立了专家系统。此外，对带式焙烧机工艺方面的研究，大部分也都局限在预热焙烧的优化分析与控制[5-6]。

尽管在焙烧过程中球团料层内部的物质流和能量流传输极其复杂，但其都遵循质量－能量守恒定律。本文在查阅大量国内外文献的基础上，对料层热质交换机制进行归纳和研究，并建立完整的料层热质传输数学模型，以期为球团焙烧过程数值模拟研究提供参考与借鉴。

1 模型架构及动力学分析

1.1 模型架构

球团焙烧包括干燥、预热、焙烧和冷却等过程。由于工艺过程之间存在相互耦合关系，且不同工艺过程的控制目标也不一样，因此本文采用料层热质传输模型对每个工艺过程进行数值模拟。设计的球团焙烧过程工艺数值模型的架构如图1所示。由图1可知，模型分为料层热质传输模型和工艺过程模拟两部分。其中，料层热质传输模型分为反应动力学模型和气固热质交换模型；工艺过程数值模拟负责建立由耦合关系和控制点组成的控制策略，模拟整个焙烧过程，并得到优化后的模拟结果。限于篇幅，本文主要阐述料层热质传输模型的构建及运算过程，工艺模拟及其应用部分将在后续做详细介绍。

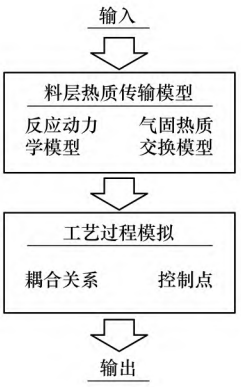


图1 球团焙烧过程数值模拟架构

Fig. 1 Mathematical modeling architecture of pellet roasting process

1.2 球团焙烧过程动力学分析

球团在焙烧过程中伴随着下列物理化学反应：① 水分的蒸发与冷凝；② 结晶水的分解；③ 磁铁矿和硫的氧化；④ 碳酸盐（$FeCO_3$、$CaCO_3$、$MgCO_3$）的分解；⑤ 内配碳的燃烧。

1.2.1 水分蒸发与冷凝

在生球干燥过程中，水分不断向表面迁移，汽化后进入气相。一般认为生球干燥由表面汽化和内部扩散两个过程组成，当球团水分高于临界值时，蒸发速率由水蒸气从球团表面向气相扩散控制；当球团水分低于临界值时，球团干燥进入降速阶段，干燥速率由气相向球团内部传热控制。水分蒸发的驱动力是气相中水蒸气体积分数和平衡体积分数之间的梯度。在达到平衡体积分数前，球团表面水分不断被蒸发进入气相，使得气相水蒸气的体积分数上升，同时球团温度几乎没有变化。随着蒸发过程不断向球团内部推进，球团水分越来越少，气相传递的热量使球团外面的干燥壳温度不断上升，内部残留的水分被汽化，通过干燥壳向气相扩散，干燥速率也逐渐缓慢。因此，可以采用两阶段干燥模型来计算生球料层水分的蒸发与冷凝。

（1）第一阶段：

$$R_w = k_w A(W_g^e - W_g) \quad W_p \geqslant W_c \tag{1}$$

式中：R_w 为水分蒸发速率，kg/(m³·s)；k_w 为传质系数(类似于传热系数)，m/s；A 为单位体积球团的传热面积，m^2/m^3；W_g^e 为气相饱和湿度，kg/m^3；W_g 为气相湿度，kg/m^3；W_p 为球团湿度，kg/m^3；W_c 为临界湿度，kg/m^3。

当气相湿度低于饱和湿度时，水分蒸发；反之，当气相湿度高于饱和湿度时，水蒸气在球团表面冷凝。

（2）第二阶段：

$$R_w = \frac{A(W_g^e - W_g)}{1/k_w + [r_p(r_p - r_w)]/(2r_w D_w^e)} \quad W_p < W_c \tag{2}$$

式中：r_p 为球团半径，m；r_w 为湿球半径，m；D_w^e 为水蒸气有效扩散系数，m^2/s。

因为蒸发或冷凝发生在球团表面，因此气相饱和湿度取决于球团表面温度。球团表面温度可近似取球团温度。故气相饱和湿度可表述为

(C)1994-2023 China Academic Journal Electronic Publishing House. All rights reserved. http://www.cnki.net

$$W_g^e=\begin{cases}1.23\times10^{-6}e^{T_p/28.41}-0.020 & T_p\leqslant373\ K\\ 8.57\times10^{-4}e^{T_p/51.39}-0.677 & 373\ K<T_p\leqslant473\ K\\ 5.20\times10^{-3}e^{T_p/62.64}-2.031 & T_p>473\ K\end{cases}\tag{3}$$

式中：T_p 为球团平均温度，K。

传质系数、扩散系数按下式[7]计算：

$$K_w=\frac{D_w}{d_p}\left[2+0.6\left(\frac{Re_p}{\varepsilon_b}\right)^{1/2}Sc^{1/3}\right]\tag{4}$$

$$D_w=\frac{1.215\ 9\times10^{-7}}{p'}T_g^{1.75}\tag{5}$$

$$D_w^e=D_w\varepsilon_p^{1.41}\tag{6}$$

式中：D_w 为水蒸气扩散系数，m^2/s；d_p 为球团直径，m；Re_p 为球团雷诺数(气体流量/黏度×球团直径)；Sc 为施密特数(气体黏度/密度×球团直径)；T_g 为气体温度，K；ε_b、ε_p 分别为料层和球团的孔隙率(以小数表示)；p'为压强，kPa。

式(5)为试验获取的扩散系数与温度、压力之间的经验方式，三个变量之间存在一定的回归关系，其不能通过严格的数学推导完成，故公式左右两侧单位不平衡。

1.2.2　结晶水分解

球团原料中结晶水通常存在于褐铁矿中。根据文献[8]的试验结果，结晶水分解反应的焓变约为 −218 kJ/kg；根据文献[9]的试验结果，其一级动力学的指前因子为 2.35 s^{-1}，$-E/R$(活化能/摩尔气体常数)的值为 −3 633.3。因此，可以得到结晶水分解反应的速率常数(k_{FeOOH}，s^{-1})为

$$k_{FeOOH}=2.35e^{-\frac{3\,633.3}{T_p}}\tag{7}$$

1.2.3　菱铁矿分解

$FeCO_3$ 分解反应的焓变约为 658 kJ/kg(吸热)，其反应动力学可参考文献[10]，反应的速率常数(k_{FeCO_3}，s^{-1})为

$$k_{FeCO_3}=1\ 0^{21.95}e^{-\frac{355\,390}{RT_p}}\tag{8}$$

1.2.4　硫氧化

原料中 S 质量分数较少，且大部分以 FeS 形式存在。采用文献[11]描述的 FeS 与高温水蒸气的反应进行动力学研究，该反应的一级动力学实测结果为

$$k_{FeS}=10^{3.629}e^{-\frac{6\,445}{T_p}}\tag{9}$$

式中：k_{FeS}为硫氧化反应的速率常数，s^{-1}。

1.2.5　磁铁矿氧化

磁铁矿氧化反应分为三个步骤：① 气相中的氧气向球团表面扩散；② 氧气通过赤铁矿层的微孔扩散；③ 与核内的磁铁矿颗粒在界面发生化学反应。磁铁矿的氧化反应大约在 250 ℃开始进行，在 600 ℃以上剧烈反应。

一般均采用收缩核模型来计算磁铁矿氧化反应动力学[12]。该模型可以表述如下。

$$\frac{Dr_m}{dt}=-\frac{C_{O_2}^g-C_{O_2}^e}{(\rho_M/29)\left[r_m/r_p)^2(1/k_{O_2})+(r_m/D_{O_2}^e)(1-r_m/r_p)+1/k_m\right]}\tag{10}$$

式中：r_m 为未反应核半径，m；t 为时间，s；$C_{O_2}^g$ 为气相氧质量浓度，kg/m^3；$C_{O_2}^e$为平衡氧质量浓度，kg/m^3；ρ_M 为球团磁铁矿质量浓度，kg/m^3；k_{O_2}为氧气传质系数，m/s；k_m 为反应速率常数，m/s；$D_{O_2}^e$为氧气有效扩散系数，m^2/s。

式(10)中相关参数的计算式如下。

$$k_m=\begin{cases}2.64\times10^8T_pe^{\frac{-19\,940}{T_p}} & T_p\leqslant661\ K\\ 1.26\times10^{-4}T_pe^{\frac{-1\,200}{T_p}} & T_p>661\ K\end{cases}\tag{11}$$

$$k_{O_2}=\frac{D_{O_2}^e}{d_p}Sh\tag{12}$$

$$Sh=2.0+0.6\left(\frac{Re_p}{\varepsilon_b}\right)^{1/2}Sc^{1/3}\tag{13}$$

$$D_{O_2}=9.5\times10^{-10}T_g^{1.75}\tag{14}$$

$$D_{O_2}^e=\varepsilon_p^{1.41}D_{O_2}\tag{15}$$

式中：D_{O_2}为氧气扩散系数，m^2/s；Sh 为舍伍德数。

1.2.6　碳酸盐分解

熔剂性球团生产需要在原料中添加石灰石或白云石，其分解反应会吸收大量的热量。碳酸盐分解反应适用于收缩核模型，但大多数动力学模型并没有考虑 $CaCO_3$ 和 $MgCO_3$ 分解温度的差异而造成的 CO_2 界面体积分数的影响[13]。通过建立双收缩核模型可以推导出在 $CaCO_3$ 和 $MgCO_3$ 同时存

(C)1994-2023 China Academic Journal Electronic Publishing House. All rights reserved.　http://www.cnki.net

在的情形下的分解速率。模型示意如图 2 所示。

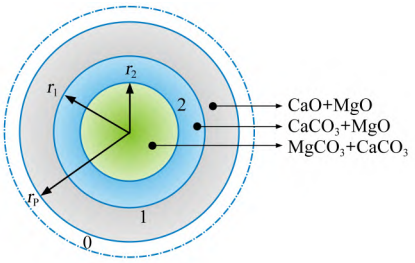


图 2 碳酸盐分解双收缩核模型

Fig. 2 Dual-shrinking-core model for decomposition of carbonates

由于 $MgCO_3$ 的分解温度比 $CaCO_3$ 低 100 ℃，因此从球团表面向内存在两个未反应核，依次为 $CaCO_3$ 未反应核(r_1 为界面 1 的半径，m)和 $MgCO_3$ 未反应核(r_2 为界面 2 的半径，m)。界面 0(r_p 为界面 0 的半径，m)为球团表面与气相接触面。

经过推导(过程略)，可以得到未反应核变化速率如下。

对 $CaCO_3$:

$$\frac{dr_1}{dt} = -\frac{1}{0.44r_1^2\rho_1}K_j(C^e_{CO_2} - C^g_{CO_2}) \tag{16}$$

式中：K_j 为分解反应总阻力，m^3/s；ρ_1 为球团中 $CaCO_3$ 质量浓度，kg/m^3；$C^g_{CO_2}$ 为气相 CO_2 质量浓度，kg/m^3；$C^e_{CO_2}$ 为气相 CO_2 平衡质量浓度，kg/m^3。

对 $MgCO_3$:

$$\frac{dr_2}{dt} = -\frac{21}{11r_2^2\rho_2}K_j(C^e_{CO_2} - C^g_{CO_2}) \tag{17}$$

式中：ρ_2 为球团中 $MgCO_3$ 质量浓度，kg/m^3。

K_j 按如下情形计算:

$$K_j = \begin{cases} K_1 = \dfrac{1}{K_B + K_C} \\ K_2 = \dfrac{1}{K_A + K_B} \\ K_3 = \dfrac{K_A}{K_AK_B + K_BK_C + K_AK_C} \\ K_4 = \dfrac{K_C}{K_AK_B + K_BK_C + K_AK_C} \end{cases} \tag{18}$$

式中：K_1 为只有 $CaCO_3$ 存在时 $CaCO_3$ 的分解阻力；K_2 为只有 $MgCO_3$ 存在时 $MgCO_3$ 的分解阻力；K_3 为 $CaCO_3$、$MgCO_3$ 同时存在时 $CaCO_3$ 的分解阻力；K_4 为 $CaCO_3$、$MgCO_3$ 同时存在时 $MgCO_3$ 的分解阻力；分解反应的阻力 K_A、K_B、K_C 分别按下面的公式计算，其单位为 s/m^3。

$$K_A = \frac{1}{D^e_{CO_2}}\left(\frac{1}{r_2} - \frac{1}{r_1}\right) + \frac{1}{r_2^2k_2} \tag{19}$$

$$K_B = \frac{1}{D^e_{CO_2}}\left(\frac{1}{r_1} - \frac{1}{r_p}\right) + \frac{1}{r_p^2k_{CO_2}} \tag{20}$$

$$K_C = \frac{1}{r_1^2k_1} \tag{21}$$

式中：$D^e_{CO_2}$ 为 CO_2 有效扩散系数，m^2/s；k_1、k_2 分别为 $CaCO_3$ 和 $MgCO_3$ 分解反应速率常数，m/s；k_{CO_2} 为 CO_2 传质系数，m/s。

反应速率常数[12]:

$$k_1 = 8.3\times10^6 e^{-\frac{18\,300}{T_p}} \tag{22}$$

$$k_2 = 2.5\times10^5 e^{-\frac{11\,200}{T_p}} \tag{23}$$

CO_2 扩散系数 D_{CO_2} 与传质系数 k_{CO_2}[13]:

$$D_{CO_2} = 7.167\times10^{-10}T_g^{1.75} \tag{24}$$

$$D^e_{CO_2} = \varepsilon_p^{1.41}D_{CO_2} \tag{25}$$

$$k_{CO_2} = \frac{D_{CO_2}}{d_p}Sh \tag{26}$$

平衡质量浓度 $C^e_{CO_2}$[13]:

$$C^e_{CO_2} = \frac{536.2}{T_p}e^{(7.35-\frac{5\,211}{T_p})} \tag{27}$$

1.2.7 固定碳燃烧

固定碳燃烧反应与碳酸盐分解和磁铁矿氧化反应不同，它既有氧气向反应界面传质又有气体反应物从界面向外扩散，该过程较复杂。只要反应界面有氧气供应并达到燃烧温度，碳就会燃烧，而氧气平衡体积分数的影响很小，因此球团温度和气相的含氧量是固定碳燃烧的决定性条件。利用收缩核模型同样可以得到固定碳未反应核半径的变化速率。

$$\frac{dr_C}{dt} = -\frac{0.375C^g_{O_2}}{\rho_C\left[r_C/r_p)^2(1/k_{OC}) + (r_C/D^e_{OC})(1-r_C/r_p) + 1/k_C\right]} \tag{28}$$

式中：r_C 为固定碳未反应核半径，m；k_C 为固定碳燃烧反应速率常数，m/s；k_{OC} 为氧气向固定碳表面传质的系数，m/s；D^e_{OC} 为有效扩散系数，m^2/s；ρ_C 为球团中固定碳质量浓度，kg/m^3；

(C)1994-2023 China Academic Journal Electronic Publishing House. All rights reserved. http://www.cnki.net

氧气向固定碳表面扩散系数(D_{OC}，m^2/s)[13]：

$$D_{OC}=8.45\times10^{-10}T_g^{1.5} \tag{29}$$

氧气向固定碳表面传质系数 k_{OC} 与反应速率常数 k_C[13]：

$$k_{OC}=\frac{D_{OC}}{d_p}Sh \tag{30}$$

$$k_C=595.6T_p e^{-\frac{17\,940}{T_p}} \tag{31}$$

2　静料层模型建立与计算

链箅机、环冷机和带式焙烧机上的球团料层为静止料层。在工艺气流垂直穿过料层进行错流换热过程中，还伴随着相应的物理化学反应；此外，在气固两相温度场发生改变的同时，其组分也随之发生变化。对料层承载体的箅床或台车而言，气流与其仅有热量交换。因此，建立传热传质模型可以预测气固相在料层长度和高度方向上不同位置的温度、组分、流量、反应速率等信息。

为了使模型简化，一般做如下假设：① 设定焙烧过程处于稳定状态；② 将料层视为球团直径相等的多孔料层；③ 设定气体在料层宽度方向均匀分布，不考虑“管道效应”；④ 设定单个球团的导热率足够大，忽略单个球团内的温度梯度；⑤ 设定气流的垂直速度远高于料层移动速度；⑥ 与气固之间的对流传热速率相比，设定球团内部导热忽略不计；⑦ 不考虑升温过程中球团孔隙率和料层空隙率的变化；⑧ 忽略传热过程中料层内部的热量损失。

2.1　热质传输方程

(1) 热量传输。料层内的热量传输遵循能量守恒定律，对气相和固相可以分别建立如下能量方程：

$$\frac{\partial(GC_gT_g)}{\partial z}+hA(T_g-T_p)+\sum(1-\alpha_i)R_i\Delta H_i=0 \tag{32}$$

$$\frac{\partial(\rho_sC_sT_p)}{\partial t}+hA(T_p-T_g)+\sum\alpha_iR_i\Delta H_i=0 \tag{33}$$

式中：G 为穿过单位面积料层的气体质量流量，$kg/(m^2\cdot s)$；C_g 为气体定压比热容，$kJ/(kg\cdot K)$；z 为料层高度坐标，m；h 为单位面积料层气固有效传热系数，$kJ/(m^2\cdot s\cdot K)$；α_i 为 i 反应的反应热在固相的分配系数；R_i 为单位体积料层 i 反应的反应速率，$kg/(m^3\cdot s)$；ΔH_i 为 i 反应的热焓，kJ/kg(规定该值吸热反应为正、放热反应为负)；ρ_s 为料层堆积密度，kg/m^3；C_s 为料层定压比热容，$kJ/(kg\cdot K)$。

球形料层气固传热面积：

$$A=\frac{6(1-\varepsilon_b)}{\varnothing d_p} \tag{34}$$

式中：$\varnothing$为球团的形状系数。

综合了辐射传热的气固之间的有效传热系数：

$$h=\frac{k_g}{d_p}\left[2.0+0.6\left(\frac{Re_p}{\varepsilon_b}\right)^{1/2}(Pr)^{1/3}\right] \tag{35}$$

式中：k_g 为气体导热系数，$kJ/(m\cdot s\cdot K)$；Pr 为普朗特数(气体黏度×比热容/导热系数)。

(2) 质量传输。在料层任意位置，随着物理化学反应的进行，气固相的密度和组分均沿料层高度方向发生改变。料层堆比重变化：

$$\frac{\partial\rho_s}{\partial t}=-\sum R_iW_{Lj} \tag{36}$$

式中：W_{Lj}为 i 反应对固相密度的影响系数；j 为固相中某组分。

反应 i 对固相密度的影响系数 W_{Lj} 如表 1 所示。

表 1　料层内物理化学反应对固相密度的影响系数

Table 1　The influence coefficient of physicochemical reaction on the density of solid phase

反应名称	反应物	反应产物	W_{Lj}
蒸发	水	$H_2O(g)$	1.00
冷凝	$H_2O(g)$	水	-1.00
$CaCO_3$ 分解	$CaCO_3$	CaO、CO_2	0.44
$MgCO_3$ 分解	$MgCO_3$	MgO、CO_2	11.00/21.00
固定碳燃烧	C	CO_2	1.00
磁铁矿氧化	Fe_3O_4	Fe_2O_3	-1.00/29.00
硫氧化	S	SO_2	1.00
$FeCO_3$ 分解	$FeCO_3$	Fe_2O_3	9.00/29.00
结晶水分解	FeOOH	Fe_2O_3	9.00/89.00

反应前后球团的组分(X_j)变化按式(37)计算，反应 i 对固相组分 j 的影响系数如表 2 所示。

$$\frac{\partial X_j\rho_s}{\partial t}=-\sum R_iW_{Lij} \tag{37}$$

式中：X_j 为固相组分 j 占总质量的比(以小数表

(C)1994-2023 China Academic Journal Electronic Publishing House. All rights reserved.　http://www.cnki.net

示)；W_{Lij}为相应组分的计算系数。

表2 料层内物理化学反应对固相组分的影响系数

Table 2 The influence coefficient of physicochemical reaction on material compositions

反应名称	反应物	影响组分	$W_{L\,ij}$
蒸发	水	水	1.00
冷凝	$H_2O(g)$	水	-1.00
$CaCO_3$ 分解	$CaCO_3$	$CaCO_3$	1.00
		CaO	-0.56
$MgCO_3$ 分解	$MgCO_3$	$MgCO_3$	1.00
		MgO	-10.00/21.00
固定碳燃烧	C	FC	1.00
磁铁矿氧化	Fe_3O_4	Fe_3O_4	1.00
		Fe_2O_3	-30.00/29.00
硫氧化	S	S	1.00
$FeCO_3$ 分解	$FeCO_3$	$FeCO_3$	1.00
		Fe_2O_3	-20.00/29.00
结晶水分解	FeOOH	FeOOH	1.00
		Fe_2O_3	-80.00/89.00

同样地，伴随着料层反应的产生，气体流量及组分(X_i)也发生如下变化。

$$\frac{\partial G}{\partial z} = \sum R_i W_{Ci} \tag{38}$$

$$\frac{\partial (X_i G)}{\partial z} = \sum R_i W_{Ci} \tag{39}$$

式中：X_i 代表气相组分 i 占总质量的比(以小数表示)；W_{Ci}为相应组分的计算系数。

物理化学反应对气相组分的影响系数如表3所示。

式(36)~(39)中反应速率 R_i 由前文所述的反应动力学模型计算得到。此外，应注意在应用式(38)计算流量变化时应包含表3中的所有系数值(W_{Ci})，而采用式(39)计算组分变化时仅包含表3中与该组分对应的系数值(W_{Ci})。如固定碳燃烧反应引起气相流量变化的结果是使气相中的 CO_2 增加(11/3)的同时消耗 O_2(-8/3)，而引起 CO_2 体积分数变化的结果是使气相中的 CO_2 增加(11/3)。

(3) 气流传输。气流在料层内的流动符合填料层强制对流的流动特性。流体通过填料层流动时其密度、黏度和速度都在变化，Ergun 方程很好地阐述这一特征，如式(3)所示。

表3 料层内物理化学反应对气相组分的影响系数

Table 3 The influence coefficient of physicochemical reaction on gas compositions

反应名称	反应物	影响组分	W_{Ci}
水分蒸发	水	$H_2O(g)$	1.00
冷凝反应	$H_2O(g)$	$H_2O(g)$	-1.00
$CaCO_3$ 分解	$CaCO_3$	CO_2	0.44
$MgCO_3$ 分解	$MgCO_3$	CO_2	11.00/21.00
固定碳燃烧	C	CO_2	11.00/3.00
		O_2	-8.00/3.00
磁铁矿氧化	Fe_3O_4	O_2	-1.00/29.00
硫氧化	S	SO_2	2.00
		O_2	-1.00
$FeCO_3$ 分解	$FeCO_3$	CO_2	11.00/29.00
		O_2	-2.00/29.00
结晶水分解	FeOOH	$H_2O(g)$	8.00/89.00

$$\frac{\partial P_g}{\partial z} = -\frac{150\mu_g(1-\varepsilon_b)^2}{(\varnothing d_p)^2 \varepsilon_b^3 \rho_g} G - \frac{1.75(1-\varepsilon_b)}{\varnothing d_p \varepsilon_b^3 \rho_g} G^2 \tag{40}$$

式中：P_g 为气体绝对压力，Pa；ρ_g 为气体密度，kg/m^3；μ_g 为气体黏度，kg/(m·s)。

公式右边第一项表示颗粒表面对流体的黏滞阻力，第二项为强紊流状态下的惯性阻力。

2.2 数学模型建立与计算

建立热质传输方程后，利用计算机高速运算的特点进行求解。求解过程一般包括将料层划分为规则的网格、对偏微分方程离散化和制定运算逻辑三大步骤。

2.2.1 网格划分

将球团料层沿高度方向和长度方向划分为若干个微元网格，如图3所示。图3中，横坐标代表时间，纵坐标代表料层高度；将长度方向料面

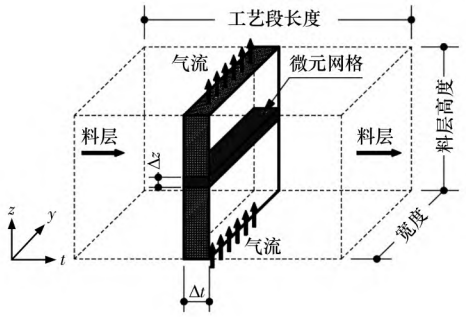


图3 料层微元网格划分

Fig. 3 Schematic diagram for grid division of bed cells

(C)1994-2023 China Academic Journal Electronic Publishing House. All rights reserved. http://www.cnki.net

平均分为 m 段、高度方向料层平均分为 n 层，这样就可以用二维坐标来表示每个微元的位置。此外，设置每个网格的时间段为 1 s，设置料层高度方向上的分层厚度不超过球团直径。

2.2.2　偏微分方程离散化

建立的数学模型需要求得偏微分方程(32)和(33)的数学解。由于料层内传热过程相当复杂，各种物性参数都是温度的函数，因此采用分析解方法几乎是不可能完成模型求解。本文采用有限差分法将连续函数离散变为不连续的阶跃变量，使用差商近似代替微商，将偏微分方程转变成代数方程来求解。按图 1 所示的气流方向，以 x、y 分别代表料层高度和时间坐标，得到偏微分方程离散后的气固相出口温度分别为

$$T_g(x+1,y)=\frac{G(x,y)\,C_g(x,y)\,T_g(x,y)-\{hA\,[T_g(x,y)-T_p(x,y)]+q_{cd}\}\Delta z}{G(x,y)\,C_g(x,y)} \tag{41}$$

$$T_p(x,y+1)=\frac{\rho_s(x,y)\,C_p(x,y)\,T_p(x,y)-\{hA\,[T_g(x,y)-T_p(x,y)]-\sum q_r\}\Delta t}{\rho_s(x,y)\,C_p(x,y)} \tag{42}$$

式中：q_{cd}为冷凝热，kJ/(m^3·s)；q_r 为除冷凝以外的所有反应热，kJ/(m^3·s)。

需要说明的是，对传热微分方程(32)和(33)，当微元足够小时，就可以用微元入口温度来计算气固相的密度与比热容等物性参数，而无需采用文献[12]所用的以微元入口与出口的平均温度进行迭代计算的方法。

对于质量传输，对式(37)和(39)采用分离变量积分就可以分别计算出气固相的组分(X_i、X_j)。

$$\frac{\partial X_j}{\partial t}=\frac{1}{\rho_s}\left(\sum R_i W_{Lij}+X_j\frac{\partial \rho_s}{\partial t}\right) \tag{43}$$

$$\frac{\partial X_i}{\partial t}=\frac{1}{G}\left(\sum R_i W_{Ci}-X_i\frac{\partial G}{\partial z}\right) \tag{44}$$

2.2.3　运算逻辑

对每个工艺段，当给定了边界条件后，计算过程都包含两个循环。通常将料层高度方向的循环作为内层循环进行计算，然后再计算长度方向(时间)的外层循环，如图 4 所示。

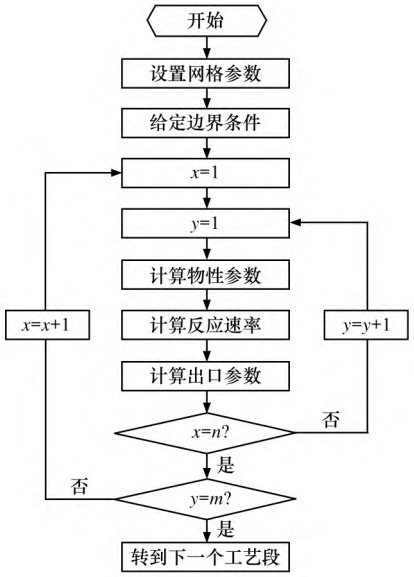


图 4　料层网格计算流程图

Fig. 4　Flowchart for computation of bed cells

3　回转窑滚动料层模型建立与计算

对回转窑内物料(一定强度的预热球)的热质传输过程进行分析，是了解和掌握其温度分布以及炉窑热工性能的重要途径。在物料进入倾斜的回转窑中进行高温焙烧的过程中，由于物料在窑内被带起、滚落后向排料端运动，在运动过程中物料与逆流的气体进行热质交换，因此其热质传输特征与静料层完全不同。

3.1　窑内物料运动

由于物料在回转窑内不断翻滚，其与气流和内壁之间的换热界面会发生周期变化，同时内壁也连续地吸热和放热，使得窑内换热机理十分复杂。因此，在研究窑内物料传热机理之前必须要了解其运动特性。

物料在窑内的运动特性对传热起着重要作用。HENEIN 等[14]将颗粒在窑内的运动分为 6 种状态：滑移、塌落、滚落、泻落、抛落和离心。对较低转速的氧化窑，球团被提升后从顶端不断滚落，球团表层会形成一个稳定的活动层，而贴近内壁的料层与内壁之间几乎没有相对运动(图 5)，因此窑内物料的运动状态可按滚落特征来研究。

通过回转窑任意截面的物料的体积流量与料层高度的关系[15]为

(C)1994-2023 China Academic Journal Electronic Publishing House. All rights reserved.　http://www.cnki.net

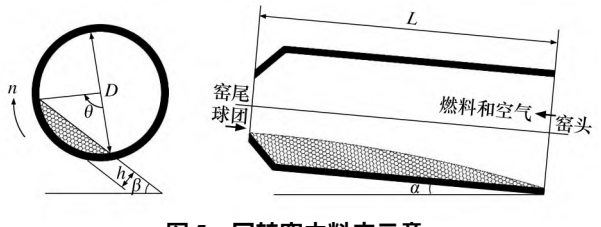


图5 回转窑内料床示意

Fig. 5 Schematic diagram of material bed within roatry kiln

(注: L 为筒体长度，m; D 为砌砖内径，m; θ 为物料填充角，rad; α 为筒体倾角，rad; β 为物料动安息角，rad; n 为转速，r/s; h 为料层高度，m)

$$\varnothing_v = \frac{4}{3}\pi n R^3\left(\frac{\tan\alpha}{\sin\beta} - \frac{\cos\beta}{\sin\beta}\frac{\mathrm{d}h}{\mathrm{d}x}\right)\left(2\frac{h}{R} - \frac{h^2}{R^2}\right)^{3/2} \tag{45}$$

式中: $\varnothing_v$ 为物料体积流量，m^3/s; R 为半径($D/2$)，m; x 为距离窑给料端的长度，m。

KRAMERS 等[15]对式(45)右边最后一项进行线性化近似处理后得到料层高度的解析解:

$$0.193\ln\left(1 - \frac{h}{0.193RN_\varnothing}\right) + \frac{L-x}{LN_\varnothing N_k} + \frac{h}{RN_\varnothing} = 0 \tag{46}$$

式中: $N_\varnothing$、N_k 分别为两个无因次变量，$N_\varnothing = (\varnothing_v\sin\beta)/(nR^3\tan\alpha)$，$N_k = (R\sin\beta)/(L\tan\alpha)$。

此外，对式(46)做适当变换，采用牛顿迭代法可求出x处的料层高度，从而进一步得到物料的填充角、填充率等运动参数。

3.2 火焰与燃烧模型

回转窑一般采用中央烧嘴进行供热，烧嘴喷出的火焰长度、形状、温度对窑内传热起着重要作用。在生产操作中，烧嘴喷出的火焰应具有一定的长度，使球团得到均匀焙烧并尽可能避免结圈。火焰长度与一次风比率、二次风温度、燃料种类、燃料量和一次风动量等相关。BEER 等[16]建立火焰长度模型如下所示。

$$L_f = 6d_0(1 + \mu^*_{AF})\left(\frac{\rho_e}{\rho_{cp}}\right)^{1/2}\left(\frac{\rho_e}{\rho_{sa}}\right)^{1/2} \tag{47}$$

式中: L_f 为火焰长度，m; d_0 为烧嘴当量直径，m; μ^*_{AF} 为理论条件下二次风作为助燃风的空燃比; ρ_e 为燃料流股(燃料+一次风)的当量密度，kg/m^3; ρ_{cp}、ρ_{sa} 分别为二次风和一次风的密度，kg/m^3。

其中，火焰根部无焰区长度 $L_{f0} = 6d_0(\rho_e/\rho_{cp})^{1/2}(\rho_e/\rho_{sa})^{1/2}$，有焰区长度 $L_{fc} = \mu^*_{AF}L_{f0}$。

燃料从中央烧嘴喷出后，其燃烧速度取决于燃料流卷吸的二次风量。沿火焰长度方向，燃料流在烧嘴出口处的体积分数最大; 随着燃烧速率的不断升高，火焰的直径不断变大，到火焰长度中点时其达到最大值; 然后由于燃料不断被消耗，燃烧速率逐渐减弱。因此，燃烧速率接近正态分布规律[17]，如图6所示。

$$\frac{\mathrm{d}F(x)}{\mathrm{d}x} = \frac{1.5F_0}{L_{fc}}\left\{1 - \frac{[x - (L - L_{f0} - 0.5L_{fc})]^2}{(0.5L_{fc})^2}\right\} \tag{48}$$

式中: $F(x)$ 与 F_0 分别为 x 处、烧嘴喷口($x=0$)的燃料流量，kg/s; x 为图6所示的距离窑给料端的长度。

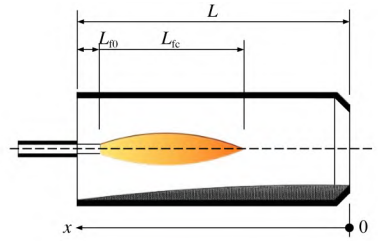


图6 火焰长度及燃烧速率计算示意

Fig. 6 Schematic diagram for calculation of flame & combustion rate

3.3 回转窑传热模型

回转窑传热模型众多，总体来说可以分为一维轴向传热模型[2]和二维截面传热模型[18]。一维轴向模型基于窑内物料充分混合的假设，将料层和自由空间的“平均”状态作为轴向位置函数; 二维截面传热模型将料层分为表面活动层和固定层(柱塞流)，并分别建立能量方程求解，其求解过程复杂。在实际应用中建立回转窑模型的主要目的是获取球团料层和逆流的气流沿窑长度方向上的热状态，气流、火焰、料层以及内壁之间的热交换，以及气流量、供热量等参数对球团焙烧的影响。因此，一维轴向模型完全可以满足这种要求。

3.3.1 传热方程

窑内主要的传热途径: 气体向裸露内衬的传热 $Q_{g\text{-}ew}$，气体向裸露料层的传热 $Q_{g\text{-}eb}$，裸露内衬

(C)1994-2023 China Academic Journal Electronic Publishing House. All rights reserved. http://www.cnki.net

向裸露料层的传热 $Q_{ew\text{-}eb}$，被料层覆盖的内衬向覆盖料层的传热 $Q_{cw\text{-}eb}$，外壁向环境的传热 Q_{sh}。窑内径向截面传热途径示意如图 7 所示。

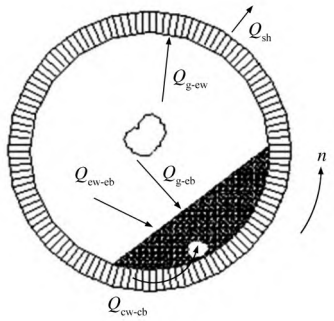


图 7　窑内径向截面传热途径示意

Fig. 7　Schematic diagram for sectional heat transfer paths in kiln

一维轴向模型将回转窑沿轴向分割成若干个圆柱形微元区域，并引入如下假设：① 每个区域气体和物料都充分混匀，可以用一个特征温度来表征；② 忽略相邻区域的轴向传热，火焰区燃料的燃烧速度由射流卷吸的二次风和一次风的氧量所控制，火焰的热量通过气体传播；③ 假定每一微元区域的料面是平坦的，考虑料层高度在轴向的变化，取其平均值为料层高度。

这样对每一个微元，气相和料层的传热微分方程分别为

$$Q_{g\text{-}ew}+Q_{g\text{-}eb}-m_gC_g\frac{dT_g}{dx}-Q_{Fuel}=0 \tag{49}$$

$$Q_{g\text{-}eb}+Q_{ew\text{-}eb}+Q_{cw\text{-}eb}-m_pC_p\frac{dT_p}{dx}-Q_r=0 \tag{50}$$

式中：C_p 为球团比热容，kJ/(kg·K)；Q_r 为料层反应消耗的热量(规定该值吸热反应为正、放热反应为负)，kJ/(m·s)；Q_{Fuel} 为燃料流股带入的热量，kJ/(m·s)；m_g 为气相质量，kg/s；m_p 为球团质量，kg/s。

考虑窑壁没有净热量累积，得到：

$$Q_{g\text{-}ew}=Q_{ew\text{-}eb}+Q_{cw\text{-}eb}+Q_{w\text{-}sh} \tag{51}$$

式中：$Q_{w\text{-}sh}$ 为窑内壁向外壳传递的热量，kJ/(m·s)。

在热平衡状态下，窑壁向外壳传递的热流等于外壳向环境的散热量：

$$Q_{w\text{-}sh}=Q_{sh\text{-}a} \tag{52}$$

式中：$Q_{sh\text{-}a}$ 为外壳向环境的散热量，kJ/(m·s)。

3.3.2　传热项的计算

气体与裸露内壁之间、气体与裸露料层之间的传热包括对流和辐射传热，对流传热系数一般采用经验式[19]。

$$Q_{g\text{-}ew}=A_{ew}\left(\sigma\varepsilon_w\varepsilon_g\frac{T_g^4-T_w^4}{T_g-T_w}+1.54\frac{\lambda_g}{D_e}Re_z^{0.575}Re_\omega^{-0.292}\right)(T_g-T_w) \tag{53}$$

$$Q_{g\text{-}ew}=A_{eb}\left(\sigma\varepsilon_p\varepsilon_g\frac{T_g^4-T_p^4}{T_g-T_p}+1.54\frac{\lambda_g}{D_e}Re_z^{0.535}Re_\omega^{0.104}\varphi^{-0.341}\right)(T_g-T_p) \tag{54}$$

式中：T_w 为内衬平均温度，K；ε_w、ε_p、ε_g 分别为内衬、球团和气体的黑度；λ_g 为气体导热系数，kJ/(m·s·K)；D_e 为窑截面气流通道(自由腔体)当量直径，m；A_{ew}、A_{eb} 分别为单位长度裸露内衬和裸露料层的面积，m^2/m；Re_z 和 Re_ω 分别为窑轴向和周向的雷诺数；φ 为填充率(以小数表示)；σ 为辐射常数，取值为 5.67×10^{-11} kJ/(m^2·s·K^4)。

裸露窑壁通过辐射对裸露料层传热：

$$Q_{ew\text{-}eb}=\sigma A_{eb}\varepsilon_w\varepsilon_p(1-\varepsilon_g)(T_w^4-T_p^4) \tag{55}$$

被覆盖内壁和被覆盖料层之间的传热是一种由非稳态导热引起的对流换热、界面处的接触传热以及辐射换热的综合传热过程，因此忽略球团之间相互运动的热阻。其计算方法如下[20]。

$$Q_{cw\text{-}eb}=h_{cw\text{-}eb}A_{cw}(T_w-T_p) \tag{56}$$

$$H_{cw\text{-}eb}=\frac{1}{0.5\sqrt{\theta/(2\rho_bk_bC_pn)}+(0.085d_p)/k_g} \tag{57}$$

式中：$h_{cw\text{-}eb}$ 为包含导热和辐射的综合换热系数，kJ/(m^2·s)；k_b 为料层的导热系数，kJ/(m·s·K)；ρ_b 为料层堆积密度，kg/m^3。

窑外壳通过自然对流和辐射向周围环境传热。其计算过程如下。

$$Q_{sh\text{-}a}=A_{sh}\left[\sigma\varepsilon_{sh}\frac{T_{sh}^4-T_0^4}{T_{sh}-T_0}+0.001\,24(T_{sh}-T_0)^{1/3}\right](T_{sh}-T_0) \tag{58}$$

式中：A_{sh} 为单位长度外壳面积，m^2/m；ε_{sh} 为外壳黑度；T_{sh} 为外壳温度，K；T_0 为大气温度，K。

窑内衬向外壳的热传导 $Q_{w\text{-}sh}$ 可以用三层圆筒

(C)1994-2023 China Academic Journal Electronic Publishing House. All rights reserved.　http://www.cnki.net

壁或平板的稳态导热热流公式计算。

3.4 模型计算

模型计算的初始条件为入窑球团和二次风参数(温度、流量、组分等),控制参数为窑排料温度(用来保证球团强度,由试验获取)。在模型计算前,仍然需要规划微元段的长度以平衡运算速度与精确度,并制定算法与逻辑使程序在任何情况下都可以收敛。根据经验,作出如下简化:① 划分微元段的长度不超过0.5 m;② 设置程序从给料端或排料端开始计算,此外,只要微元段足够小,无需对每个微元采用复杂的四阶龙格库塔法求解;③ 由于传热系数大都采用经验公式计算,因此需要根据具体情况对程序做适当调整,使模拟结果更符合生产实际情况。

当从排料端开始模拟时,模型以排料温度作为初始条件,以给料端球团温度与预热二段排料温度的偏差作为控制变量来调整供热量,以窑尾气体温度与球团温度的差值作为辅助调整变量来调整传热系数。

当从给料端开始模拟时,模型以排料温度作为控制变量来调整供热量,以入窑二次风温度与冷却二段排气温度的偏差作为辅助变量来调整传热系数。模型计算及调整流程如图8所示。

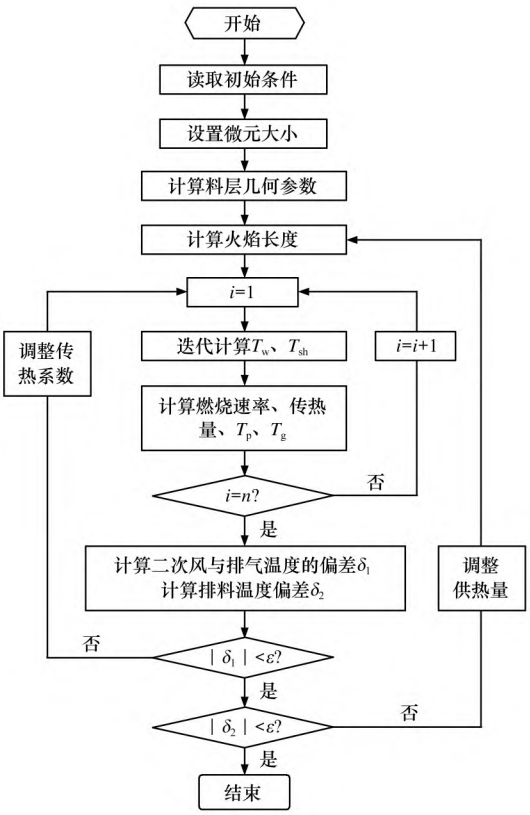


图8 回转窑模型计算流程

Fig. 8 Flowchart for compulation of kiln model

4 结 论

本文通过构建物理-化学反应动力学模型来进一步阐述料层热质变化特征,并基于传质-传热平衡方程分别构建静料层和滚动料层的热质交换模型,得到如下具体结论。

(1) 应用双收缩核模型构建的$CaCO_3$和$MgCO_3$分解模型充分考虑了因分解温度不同、不同反应核界面CO_2平衡质量浓度对$CaCO_3$和$MgCO_3$分解速率的影响,具有较高的真实性。

(2) 由于影响磁铁矿氧化的因素多,使用基于收缩核模型构建的磁铁矿氧化模型时应结合特定原料条件下的试验结果对模型的相关参数进行修正,提高模拟准确度。

(3) 在回转窑一维温度场模型中嵌入物料运动与燃烧模型,考虑了料层运动形态、火焰及燃料分布对窑内传热的影响,使滚动料层的模拟具有较高的真实性,同时又避免了复杂的数值运算,提高了运算速度。利用本文提供的模型和算法,在给出初始条件和边界条件的情况下,可直接模拟回转窑内的传热过程。

参考文献:

[1] 姜涛. 我国钢铁精料生产现状、存在问题及对策[R]. 长沙: 2022年全国烧结球团技术交流年会, 2022.
JIANG Tao. The present situation, problems and counter-measures of iron concentrate production in China[R]. Changsha: Proceedings of the 2022's annual conference on sintering & pelletizing technology, 2022.

[2] 解海波. 504 m^2带式焙烧机设计理论模型的分析论证[J]. 中国冶金, 2015, 25(2): 21-28.
XIE Haibo. Analytic demonstration of the theoretical design model of 504 m^2 D-L straight grate[J]. China Metallurgy, 2015, 25(2): 21-28.

[3] 周浩宇, 贺新华, 刘前. 带式焙烧机设计用热工数学模型技术的研究与验证[J]. 工业炉, 2018, 40(5): 36-39.

(C)1994-2023 China Academic Journal Electronic Publishing House. All rights reserved. http://www.cnki.net

ZHOU Haoyu，HE Xinhua，LIU Qian. Research and verification of mathematical model for straight-grate pellet thermal system [J]. Industrial Furnance，2018，40(5)：36－39.

[4] 范晓慧. 铁矿造块数学模型与专家系统 [M]. 北京：科学出版社，2013.
FAN Xiaohui. Mathematical models and expert systems of iron ore agglomeration [M]. Beijing：Science Press，2013.

[5] 周卫. 带式焙烧机生产过程中预热焙烧优化控制 [J]. 冶金自动化，2014，38(3)：72－75.
ZHOU Wei. Optimal control of preheating and firing process of the traveling grate [J]. Metallurgical Industry Automation，2014，38(3)：72－75.

[6] 刘丕亮，臧日浩，崔桂梅，等. 带式焙烧机焙烧温度分析研究 [J]. 烧结球团，2018，43(2)：29－32；36.
LIU Piliang，ZANG Rihao，CUI Guimei，et al. Analysis and research on roasting temperature of travelling grate [J]. Sintering and Pelletizing，2018，43(2)：29－32；36.

[7] MANSOOR B. Dynamic simulation of pellet induration process in straight grate system [J]. International Journal of Mineral Processing，2008，89(1－4)：30－39.

[8] 李金莲，刘万山，李艳茹，等. 热分析技术在褐铁矿结晶水热分解中应用研究 [J]. 钢铁，2011，46(5)：19－22.
LI Jinlian，LIU Wanshan，LI Yanru，et al. Applied research on thermal decomposition of limonite with crystal water by thermal analysis technology [J]. Iron & Steel，2011，46(5)：19－22.

[9] 张翔宇，李家林，刘小银. 某褐铁矿脱水反应动力学研究 [J]. 金属材料与冶金工程，2010，38(4)：9－13.
ZHANG Xiangyu，LI Jialin，LIU Xiaoyin. Study on the dehydration kinetics for the limonitic [J]. Metal Materials and Metallurgy Engineering，2010，38(4)：9－13.

[10] 庞永莉，肖国先，酒少武. 菱铁矿热分解动力学研究 [J]. 西安建筑科技大学学报(自然科学版)，2007，39(1)：136－144.
PANG Yongli XIAO Guoxian，QIU Shaowu. Study on thermal decomposition kinetics of siderite [J]. Journal of Xi´an University of Architecture & Technology(Natural Science Edition)，2007，39(1)：136－144.

[11] 郭先健，刘纯鹏. FeS 的水蒸汽高温氧化动力学 [J]. 化工冶金，1994，15(3)：209－213.
GUO Xianjian，LIU Chunpeng. Kinetics of FeS oxidization with steam at elevated temperature [J]. Chemical metallurgy，1994，15(3)：209－213.

[12] THURLBY J A. A dynamic mathematical model of the complete grate/kiln iron-ore pellet induration process [J]. Metallurgical transactions B，1988，19：103－112.

[13] MAJUMDER S，NATEKAR P V，RUNKANA V. Virtual indurator：A tool for simulation of induration of wet iron ore pellets on a moving grate [J]. Computers & Chemical Engineering，2009，33(6)：1141－1152.

[14] HENEIN H，BRIMACOMBE J K，WATKINSON A P. Experimental study of transverse bed motion in rotary kilns [J]. Metallurgical transactions B，1983，14：191－205.

[15] KRAMERS H，CROOCKEWIT P. The passage of granular solids through inclined rotary kilns [J]. Chemical Engineering Science，1952，1(6)：259－265.

[16] BEER T M，CHIGIER M A. Combustion aerodynamics [M]. New York：Applied Science Publishers，1972.

[17] XIAO Xingguo，LI Jiaxin，CAO Tongyou，et al. Mathematical model for the rotary kiln process and its application [J]. Journal of Materials Science and Technology，1991(1)：55－64.

[18] BARR P V，BRIMACOMBE J K，WATKINSON A P. A heat-transfer model for the rotary kiln：Part II. Development of the cross-section model [J]. Metallurgical transactions B，1989，20：403－419.

[19] TSCHENG S H，WATKINSON A P. Convective heat transfer in a rotary kiln [J]. Canadian Journal of Chemical Engineering，1979，57(4)：433－443.

[20] LI S Q，MA L B，WAN W，et al. A mathematical model of heat transfer in a rotary kiln thermos-reactor [J]. Chemical Engineering & Technology，2005，28(12)：1480－1489.

(C)1994-2023 China Academic Journal Electronic Publishing House. All rights reserved.　http://www.cnki.net