

UNIVERSITÉ DU QUÉBEC

**MÉMOIRE
PRÉSENTÉ À
L'UNIVERSITÉ DU QUÉBEC À CHICOUTIMI
COMME EXIGENCE PARTIELLE
DE LA MAÎTRISE EN INGÉNIERIE**

**PAR
GUY SIMARD**

**LA MODÉLISATION DE LA COMBUSTION DANS UN
FOUR DE CALCINATION DE COKE DE PÉTROLE**

AUTOMNE 1992



Mise en garde/Advice

Afin de rendre accessible au plus grand nombre le résultat des travaux de recherche menés par ses étudiants gradués et dans l'esprit des règles qui régissent le dépôt et la diffusion des mémoires et thèses produits dans cette Institution, **l'Université du Québec à Chicoutimi (UQAC)** est fière de rendre accessible une version complète et gratuite de cette œuvre.

Motivated by a desire to make the results of its graduate students' research accessible to all, and in accordance with the rules governing the acceptance and diffusion of dissertations and theses in this Institution, the **Université du Québec à Chicoutimi (UQAC)** is proud to make a complete version of this work available at no cost to the reader.

L'auteur conserve néanmoins la propriété du droit d'auteur qui protège ce mémoire ou cette thèse. Ni le mémoire ou la thèse ni des extraits substantiels de ceux-ci ne peuvent être imprimés ou autrement reproduits sans son autorisation.

The author retains ownership of the copyright of this dissertation or thesis. Neither the dissertation or thesis, nor substantial extracts from it, may be printed or otherwise reproduced without the author's permission.

À mon épouse Valerie et à mes enfants Karim, Samuel

Sommaire

L'industrie de l'aluminium utilise le coke de pétrole vert pour la fabrication d'électrodes et le coke doit être calciné dans les fours rotatifs. Pendant le processus de calcination certains phénomènes physiques importants interviennent, tels le dégagement de matières volatiles, la génération de poussières de coke, la combustion des matières volatiles et des poussières. La qualité du coke produit dépend fortement du taux de chauffage, de la température maximale et du refroidissement.

Un four de calcination est un échangeur à contre-courant. Le coke se déplace dans le four sous l'effet combiné de la rotation et de l'inclinaison. L'air nécessaire à la combustion s'écoule dans le sens opposé du coke et est fourni par quatre tuyères localisées en amont de la zone de combustion. L'énergie nécessaire à la calcination du coke de pétrole provient presque en totalité de la combustion partielle des matières volatiles libérées à la surface du lit de coke.

Les matières volatiles commencent à se dégager lorsque la température du coke atteint environ 500 °C. Seulement environ un tiers des matières volatiles réagissent, le reste est récupéré pour la combustion dans des bouilloires. Soulignons la présence de trois espèces chimiques constituant les matières volatiles, soit l'hydrogène, le méthane et le goudron. Ainsi le transfert de chaleur qui contrôle principalement le processus de calcination dépend fortement de la

combustion. En opération normale un four rotatif est autosuffisant du point de vue énergétique .

Un modèle en trois dimensions en régime transitoire d'un four rotatif est disponible. Il prend en compte les phénomènes physiques de base intervenant dans le transfert de chaleur, tels les écoulements du gaz et du coke, le rayonnement et la combustion représentée par l'imposition d'une source d'énergie. Toutefois il faut améliorer le modèle de combustion, vu sa grande influence sur les résultats obtenus.

Dans un four de calcination, la combustion est contrôlée principalement par la diffusion provenant de l'écoulement turbulent. Cependant chaque matière volatile a une vitesse de réaction distincte et se dégage à des endroits différents, ainsi il est important de considérer l'aspect cinétique dans la combustion. Une approche est envisagée pour tenir compte à la fois des effets de la diffusion et de la cinétique dans un même modèle.

La combustion des particules de coke transportées par le gaz est une source d'énergie non négligeable. Il est proposé de traiter les particules dans le gaz comme une espèce chimique, c'est-à-dire en considérant celles-ci comme une concentration de particules. Ainsi il est posé une équation de conservation de la même forme que celle formulée pour chaque matière volatile.

L'ensemble des équations aux dérivées partielles obtenues est solutionné par

la méthode des volumes finis utilisant le logiciel PHOENICS de CHAM(UK).

Une simulation numérique a été faite à l'aide du nouveau modèle de combustion et certaines fractions massiques sont comparées avec des mesures prises lors d'une campagne de mesures effectuée en usine [1].

Remerciements

Je tiens à remercier sincèrement les professeurs André Charette et Yasar Kocaefe de l'U.Q.A.C qui, comme directeurs de recherche, m'ont appuyé et guidé tout au long de la réalisation de ce travail.

Mes remerciements s'adressent également aux membres du Groupe de Recherche en Ingénierie des Systèmes (G.R.I.P.S.), plus particulièrement à MM. Réjean Ouellet, M.Sc.A., Steve Brisson B.Sc et André Arsenault M.Sc.A. qui m'ont encouragé et conseillé dans la poursuite de mon travail.

Ma reconnaissance à l'égard de M. Rung Tien Bui, coordonnateur du G.R.I.P.S. est aussi des plus vives; son support à tous les niveaux et tout au long de mes études de maîtrise a toujours été indéfectible.

Enfin je tiens à remercier le comité de direction du G.R.I.P.S. pour l'aide financière dont j'ai pu bénéficier pendant l'élaboration de ce projet.

Nomenclature

a, b	exposants dans l'équation d'Arrhénius	
a_x	coefficient stoechiométrique	
c_p	chaleur massique à pression constante	$J\ kg^{-1}\ K^{-1}$
C_x	constante du modèle de combustion	
E_i	émittance de la surface i	$W\ m^{-2}$
\bar{f}	fraction de mélange moyenne	
f_{st}	fraction de mélange stoechiométrique	
G_k	génération de l'énergie cinétique de turbulence	$kg\ m\ s^{-3}\ m^{-2}$
\bar{h}	enthalpie massique moyenne	$J\ kg^{-1}$
h_c	chaleur de combustion	$J\ kg^{-1}$
i	rapport stoechiométrique	
k	énergie cinétique de turbulence	$m^2\ s^{-1}$
k^*	conductivité thermique	$W\ m^{-1}\ K^{-1}$
L	longueur du lit	m
m_x	fraction massique de l'espèce chimique x	$kg_x\ kg_{total}^{-1}$
$\overline{m_x}$	fraction massique moyenne de l'espèce chimique x	$kg_x\ kg_{total}^{-1}$
M_x	masse molaire de l'espèce chimique x	$kg_x\ kmole^{-1}$
p	pression dynamique	Pa
P	pression atmosphérique	Pa
q_x	flux de chaleur dans la direction x	$W\ m^{-2}$
$Q_{i \leftrightarrow j}$	transfert radiatif entre i et j	W
r	rayon	m
R	constante des gaz	$J\ mole^{-1}\ K^{-1}$
R_x	taux de réaction augmenté	$kg\ s^{-1}\ m^{-3}$

$\overline{S_i S_j}$	aire d'échange total	m^2
T	température absolue	K
u ,v ,w	composantes de vitesse dans un repère en coordonnées curvilignes généralisées	$m \ s^{-1}$
$\overline{u_\theta}$	vitesse moyenne angulaire	ms^{-1}
$\overline{v_r}$	vitesse moyenne radiale	ms^{-1}
$\overline{w_z}$	vitesse moyenne axiale	ms^{-1}
x , y , z	coordonnées dans l'espace physique	
Δh_x	chaleur de combustion pour l'espèce chimique x	$J \ kg^{-1}$
<u>Lettres grecques</u>		
Γ	angle de remplissage	rad
Γ	variable de PHOENICS	
ϵ	taux de dissipation	$m^2 \ s^{-3}$
ξ , η , ζ'	coordonnées dans l'espace de calcul	
θ	coordonnée angulaire	rad
θ_a	épaisseur active	m
μ_{eff}	viscosité dynamique effective	$kg \ s^{-1} \ m^{-1}$
ρ	densité du gaz	$kg \ m^{-3}$
σ_f	constante dans l'équation de la fraction de mélange	
$\sigma_k, \sigma_\epsilon, C_1, C_2, C_\mu$	constantes du modèle de turbulence k- ϵ	
σ	constante de Stefan-Boltzmann	$W \ m^{-2} \ K^{-4}$
τ_s	échelle de diffusion temporelle	s
τ_x	contrainte de cisaillement dans la direction x	$N \ m^{-2}$
ϕ	angle dynamique	rad
ϕ	variable de PHOENICS	
ω	vitesse de rotation	$rad \ s^{-1}$

Table des matières

Sommaire	iii
Remerciements	vi
Nomenclature	vii
1 Introduction	1
1.1 La motivation derrière le présent travail	4
2 Une revue du modèle 3D du four de calcination	7
2.1 Les grandes lignes du modèle 3D	7
2.2 Le modèle de la chambre de combustion	10
2.2.1 L'écoulement du gaz en régime turbulent	10
2.2.2 Le transfert de chaleur dans la chambre de combustion	14
2.2.2.1 Le transfert de chaleur par rayonnement	15
2.2.2.2 La combustion	17
2.3 Le modèle du lit de coke	23
2.4 Le modèle des réfractaires	28
3 Le modèle de combustion amélioré	32
3.1 Les hypothèses du modèle	32
3.2 Les équations de conservation	37

3.3	Le dégagement des matières volatiles et des poussières de coke	44
4	La solution numérique	49
4.1	Le logiciel PHOENICS	49
4.2	La discrétisation des équations par la méthode des volumes finis	50
4.3	La discrétisation des volumes de contrôle	53
4.4	La simulation	60
5	Résultats et discussion	64
5.1	Le lit de coke	64
5.2	La chambre de combustion	67
5.3	Les réfractaires	73
5.4	Bilans	75
5.5	La comparaison des résultats avec les résultats antérieurs .	76
5.6	Les figures	80
5.7	Les tableaux	108
6	Conclusion	112
	Bibliographie	114
	Annexe A Paramètres d'opération	117

Annexe B	Résultats du modèle antérieur reproduits pour fins de comparaison	118
----------	--	-----

1

Introduction

Dans les alumineries, les électrodes de carbone sont utilisées comme anodes et cathodes dans les cuves d'électrolyse. Les électrodes sont fabriquées à partir de coke de pétrole lié par un brai de charbon. Le coke provient d'un four de calcination qui libère les matières volatiles et l'humidité et lui confère une structure cristalline appropriée.

Le four rotatif utilisé pour la calcination (figure 1) a une longueur de 60m et un diamètre de 2m. Il constitue un échangeur à contre-courant. La circulation du coke est assurée par une faible pente du réacteur cylindrique tandis que les gaz chauds voyagent en sens opposé.

Les matières volatiles sont principalement l'hydrogène, le méthane et le goudron. Ces gaz sont libérés de la surface du lit de coke et brûlent dans la partie supérieure du four cylindrique.

Le long de son parcours dans le four rotatif le coke de pétrole traverse principalement trois zones, soit le préchauffage, la calcination et le refroidissement (figure 2). À chacune de ces zones est associée une cinétique de dégagement des matières volatiles qui dépend de la température locale du coke.

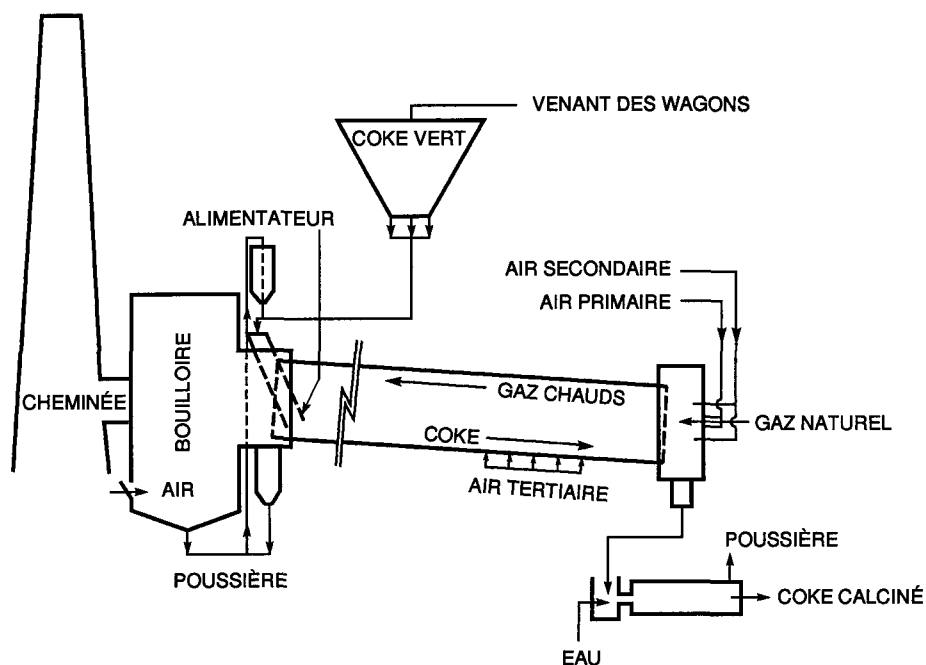


Figure 1 Schéma du procédé de calcination de coke de pétrole

L'énergie nécessaire au préchauffage du coke de pétrole est transférée des gaz chauds circulant au-dessus du coke dans la direction inverse. Cette énergie est le résultat de la combustion des matières volatiles plus en aval dans la zone de préchauffage et dans la zone de calcination. En plus des matières volatiles, la combustion d'une fraction des poussières de coke transportées par le gaz contribue à augmenter la température des gaz.

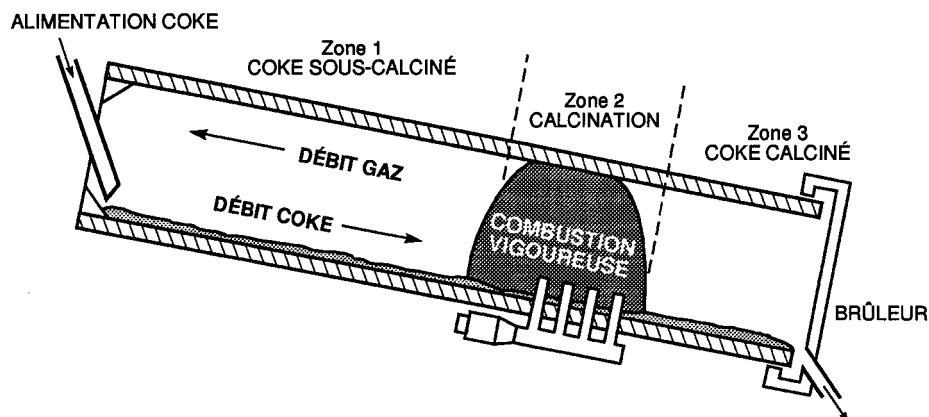


Figure 2 Zones énergétiques dans un four de calcination de coke de pétrole

Pour assurer une bonne combustion, il est prévu dans le procédé un ajout d'air dans la zone de calcination du coke de pétrole. L'air est acheminé à l'intérieur du four cylindrique à l'aide de quatre tuyères (figures 1,2); ce type d'entrée d'air est couramment appelé *l'air tertiaire*. Les tuyères sont fixées sur la paroi intérieure du four cylindrique et elles sont par conséquent entraînées par la rotation du four.

En opération normale, après une procédure de démarrage, ce procédé de calcination du coke de pétrole est dit autosuffisant en énergie. La quantité de matières volatiles libérées excède les besoins énergétiques requis pour la calcination du coke de pétrole. L'excédent de matières volatiles non brûlées est récupéré à la sortie des gaz pour alimenter des bouilloires.

La qualité du coke calciné dépend principalement du taux de chauffage qui doit être inférieur à 200 °C/min et de la température maximale qui est ciblée à 1250 °C. Ces facteurs contrôlent la porosité et par conséquent la densité en vrac du coke

calciné produit à la sortie. Par exemple, une densité en vrac trop élevée du coke calciné fournit des électrodes de mauvaise qualité qui affectent directement le bon fonctionnement des cuves d'électrolyse qui produisent l'aluminium. De plus, le débit d'air aux tuyères peut également affecter la qualité du coke, puisqu'un débit d'air trop élevé augmentera le taux de combustion des matières volatiles et par conséquent accroîtra la température des gaz, ce qui causera un déplacement non désiré de la zone de combustion. En opération normale le procédé de calcination est contrôlé principalement en ajustant le débit d'air, le débit de coke vert et la vitesse de rotation du four.

1.1 La motivation derrière le présent travail

Un projet conjoint a été inauguré à la fin de 1988 entre l'Université du Québec à Chicoutimi (le GRIPS), Alcan International Limitée (le CRDA), la Société d'électrolyse et de chimie Alcan limitée (SÉCAL) et l'Université de Colombie Britannique (UBC), avec comme objectif la modélisation mathématique du four rotatif de calcination du coke de pétrole. Deux modèles étaient à construire. Le premier à une dimension (1D), visait l'analyse de l'opération du four, alors que le deuxième à trois dimensions (3D), visait les aspects de conception. Le modèle 1D, sujet d'une thèse de doctorat par Jean Perron [2], a fait l'objet directement ou indirectement de plusieurs rapports industriels et publications scientifiques [3-7].

Dû à sa complexité, le modèle 3D a requis plus de temps pour son développement. De plus, comme dans toute modélisation mathématique, une validation expérimentale est nécessaire. À cause des difficultés et des coûts inhérents à l'obtention de données expérimentales suffisantes et à leur interprétation rigoureuse d'une part, et d'autre part à cause du temps de calcul très long nécessaire à la simulation du four réel de l'usine, il a été décidé de développer une version préliminaire du modèle 3D sur le four pilote de l'Université de Colombie Britannique (UBC) qui est de dimensions beaucoup plus modestes. La validation s'est avérée satisfaisante [8, 9].

L'étape suivante a consisté à transposer le modèle 3D du four de U.B.C. au four réel de l'usine. Cette étape d'envergure a duré plusieurs mois en 1991, étant donné la complexité et les particularités du four.

Le modèle 3D du four réel ainsi développé représente adéquatement les phénomènes de base tels les écoulements des gaz et du solide et le transfert de chaleur. Cependant ce qui caractérise le four réel c'est la combustion qui est contrôlée par la présence de matières volatiles dégagées du lit de coke tout au long du four. Dans le modèle 3D du four réel, la combustion est représentée en utilisant l'approche de la fraction de mélange où toutes les matières volatiles et les poussières sont associées à une seule variable. En conséquence l'ensemble des réactifs brûlent en tant que mélange indépendamment de leur nature, ce qui est loin de représenter fidèlement le type de combustion rencontré dans un four réel.

Ainsi l'objectif du présent travail consiste à améliorer le modèle de combustion pour tenir compte de *la cinétique de combustion de chaque matière volatile et des poussières*. Dans le contexte du projet de modélisation du four de calcination, cette approche différente va améliorer la distribution des sources d'énergie dans le four et par conséquent elle va favoriser le transfert de chaleur au lit de coke. De plus elle va faciliter la validation du modèle 3D puisque des mesures de plusieurs concentrations d'espèces chimiques et de poussières de coke sont disponibles à la sortie des gaz.

Le modèle existant du four en 3D a été développé dans l'environnement du logiciel PHOENICS. Ce logiciel est utilisé principalement pour étudier les phénomènes thermo-fluides, et est largement utilisé dans la recherche puisqu'il permet l'ajout de codes sources. Ainsi PHOENICS est utilisé en partie pour effectuer certaines tâches tandis que l'utilisateur peut introduire son code source pour exécuter des tâches spécifiques comme c'est le cas du nouveau modèle de combustion.

2

Une revue du modèle 3D du four de calcination

2.1 Les grandes lignes du modèle 3D

Le modèle global du four est contruit en trois parties: le modèle de la chambre de combustion , le modèle du lit de coke et le modèle des réfractaires. En plus d'offrir un programme plus transparent, plus facile à structurer et à vérifier, cette construction modulaire permet d'utiliser chacun des trois modèles séparément pour faire des simulations partielles. De plus, comme il existe des écarts considérables entre les valeurs numériques des propriétés physiques des deux milieux, le gaz et le coke, une structure séparée aide à éviter des difficultés numériques provenant de ces écarts. Enfin, l'usage du calcul parallèle est optionnel où chaque modèle ou sous-modèle est traité simultanément par un processeur [8], ce qui permet de réduire le temps réel de simulation.

Les trois modèles sont basés sur une résolution d'équations de conservation appliquées au mouvement et à l'énergie, utilisant le code PHOENICS [10]

Le gaz et le lit comprennent chacun deux sous-modèles, l'un pour l'écoulement et l'autre pour l'énergie, incluant la combustion des matières volatiles. Le modèle global ,incluant les réfractaires, est ainsi composé de cinq sous-modèles. En résolvant ces sous-modèles séparément, la stabilité numérique est plus facile à obtenir. Les cinq sous-modèles sont traités par plusieurs pro-

cesseurs et couplés ensemble, le tout avec l'aide d'un répartiteur de tâches appelé TASKMAN [9] .

Dans le lit de coke, le sous-modèle de l'écoulement calcule les trois composantes de vitesse et la pression. L'écoulement transversal est laminaire et séparé en deux couches, la couche active à la surface qui descend en cascade à grandes vitesses, et la couche inférieure dont l'écoulement en arc de cercle vers le haut est pratiquement frontal (écoulement piston). Pour l'écoulement transversal, la simulation se fait en considérant deux viscosités newtonniennes pour les deux couches, celle de la couche frontale étant de cinq ordres de grandeur supérieure à celle de la couche active. L'épaisseur de la couche active est calculée avec une corrélation empirique déterminée expérimentalement au laboratoire du GRIPS sur un modèle réduit par Gauthier [11]. Pour l'écoulement axial, une viscosité unique est utilisée afin de refléter le fait qu'il n'y a pas d'écoulement en cascade dans cette direction.

Pour l'énergie du lit, la conduction et la convection sont incluses, avec une conductivité thermique équivalente affectée au coke.

Dans le gaz, le sous-modèle de l'écoulement calcule les trois composantes de vitesse, la pression et les variables de turbulence utilisant le modèle $k-\epsilon$. Ce sous-modèle tient compte des infiltrations d'air par les ouvertures. Le sous-modèle d'énergie calcule les températures, avec un modèle de combustion contrôlé par une réaction chimique globale. Ce dernier présuppose que le combustible et

l'oxygène ne peuvent coexister au même endroit. Le dégagement de matières volatiles est calculé à partir de données expérimentales [12] et imposé comme une condition aux limites. Le modèle de combustion donne la masse totale des produits de combustion, qu'on fractionne ensuite en H_2O et CO_2 dans le rapport des masses molaires.

Dans son état actuel, le modèle incorpore tous les phénomènes significatifs sauf le poussierage et le transfert de chaleur dans les réfractaires. L'effet du poussierage sur le transfert radiatif peut être pris en compte en faisant varier le coefficient d'absorption des gaz en fonction de la concentration des poussières. Présentement le modèle considère le gaz comme étant gris avec une distribution du coefficient d'absorption dans la direction axiale en fonction des concentrations des produits de combustion. De plus, les matières volatiles sont prises comme une seule et non pas trois espèces séparées. Ce sont là des points à améliorer par la suite.

Mentionnons aussi un point positif de ce modèle. Les tuyères peuvent changer de position angulaire autour de l'axe du four, ce qui permet de simuler l'effet dynamique de leur rotation sur l'écoulement des gaz.

Pour terminer, quelques mots sur les maillages. Trois maillages sont utilisés: le premier en coordonnées curvilignes, construit à partir d'un générateur (Wu [13]) est appliqué au lit, le second en coordonnées cylindriques est appliqué à la chambre

pour simuler la plupart des phénomènes physiques sauf pour le rayonnement où l'on utilise un troisième maillage non-structuré facilitant le regroupement des volumes finis pour donner les zones utilisées dans le transfert radiatif. Les raisons sont d'ordre pratique. Alors que le maillage curviligne permet de respecter la surface plane du lit et éviter les marches d'escalier artificielles, le maillage cylindrique de la chambre permet de repositionner les tuyères selon la rotation, et facilite l'ajustement des paramètres numériques pour obtenir la convergence dans le calcul des gaz.

2.2 Le modèle de la chambre de combustion

2.2.1 L'écoulement du gaz en régime turbulent

La forme cylindrique du four de calcination suggère par elle-même de présenter les équations différentielles dans un repère en coordonnées cylindriques (θ, r, z) et les équations sont écrites en terme de variables primitives (u_θ, v_r, w_z) .

Le gaz circule dans la partie supérieure du cylindre et le coke de pétrole dans la partie inférieure. Ainsi la partie du maillage occupée par le coke doit être bloquée pour simuler l'écoulement du gaz. L'utilisation des coordonnées cylindriques implique que la limite inférieure du volume de contrôle du gaz aura une forme irrégulière (dents de scie). Les irrégularités apparaissent dans la direction transversale (θ, r) du cylindre, mais le gaz circule principalement dans

la direction axiale (z), ainsi l'effet de rugosité de la limite inférieure du volume de contrôle aura très peu d'impact sur l'écoulement principal.

En raison de la vitesse élevée du gaz, soit environ 15 m/s, une particule de gaz aura un temps de résidence assez court, soit environ 2 s, ainsi il est raisonnable de supposer l'écoulement en régime stationnaire. Il faut noter par ailleurs que les orifices de sortie des tuyères, fixées à la paroi interne du four, ne sont pas uniformément distribuées sur la circonférence. En conséquence le déplacement des tuyères perturbe l'écoulement par suite de la rotation. On peut vérifier toutefois que les perturbations sont localisées tout près des tuyères. Des essais avec des positions différentes de tuyères ont montré que le profil de vitesse se développe rapidement en aval des tuyères. Ainsi on supposera fixe la position des orifices d'entrée d'air tout au long d'une simulation numérique, tout en considérant l'effet de rotation du cylindre sur le gaz près de la paroi interne. Dans ce type de procédé industriel avec de grandes dimensions et avec des débits de gaz élevés, on obtient un nombre de Reynolds très élevé d'où l'importance de traiter l'écoulement en régime turbulent.

Le gaz dans la chambre transporte des fines poussières. Celles-ci sont captées par le gaz suivant plusieurs modes comme par exemple l'effet de brassage causé par les pattes des tuyères lorsqu'elles traversent le lit de coke. Au sens strict le gaz avec les poussières serait un fluide hétérogène (bi-phasé), cependant les poussières dans le gaz se retrouvent avec une faible concentration près de la

surface du lit de coke. Ainsi il apparaît raisonnable de considérer le fluide dans la chambre comme newtonien.

L'écoulement du gaz est représenté par un système d'équations de conservation *moyennes* pour tenir compte du régime turbulent.

L'équation de continuité s'écrit sous la forme suivante:

$$\frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r}(\rho r \overline{v_r}) + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial \theta}(\rho \overline{u_\theta}) + \frac{\partial}{\partial z}(\rho \overline{w_z}) = 0 \quad (1)$$

L'équation pour la composante-r s'écrit :

$$\begin{aligned} & \rho \left[\overline{v_r} \frac{\partial \overline{v_r}}{\partial r} + \frac{\overline{u_\theta}}{r} \frac{\partial \overline{v_r}}{\partial \theta} + \overline{w_z} \frac{\partial \overline{v_r}}{\partial z} - \frac{\overline{u_\theta}^2}{r} \right] = - \frac{\partial p}{\partial r} \\ & + \mu_{eff} \left[\frac{\partial^2 \overline{v_r}}{\partial r^2} + \frac{1}{r} \frac{\partial \overline{v_r}}{\partial r} + \frac{1}{r^2} \frac{\partial^2 \overline{v_r}}{\partial \theta^2} + \frac{\partial^2 \overline{v_r}}{\partial z^2} - \frac{\overline{v_r}}{r^2} - \frac{2}{r^2} \frac{\partial \overline{u_\theta}}{\partial \theta} \right] \end{aligned} \quad (2)$$

L'équation pour la composante- θ s'écrit :

$$\begin{aligned} & \rho \left[\overline{v_r} \frac{\partial \overline{u_\theta}}{\partial r} + \frac{\overline{u_\theta}}{r} \frac{\partial \overline{u_\theta}}{\partial \theta} + \overline{w_z} \frac{\partial \overline{u_\theta}}{\partial z} + \frac{\overline{v_r} \overline{u_\theta}}{r} \right] = - \frac{1}{r} \frac{\partial p}{\partial \theta} \\ & + \mu_{eff} \left[\frac{\partial^2 \overline{u_\theta}}{\partial r^2} + \frac{1}{r} \frac{\partial \overline{u_\theta}}{\partial r} + \frac{1}{r^2} \frac{\partial^2 \overline{u_\theta}}{\partial \theta^2} + \frac{\partial^2 \overline{u_\theta}}{\partial z^2} + \frac{2}{r^2} \frac{\partial \overline{v_r}}{\partial \theta} - \frac{\overline{u_\theta}}{r^2} \right] \end{aligned} \quad (3)$$

L'équation pour la composante-z s'écrit :

$$\rho \left[\overline{v_r} \frac{\partial \overline{w_z}}{\partial r} + \frac{\overline{u_\theta}}{r} \frac{\partial \overline{w_z}}{\partial \theta} + \overline{w_z} \frac{\partial \overline{w_\theta}}{\partial z} \right] = - \frac{\partial p}{\partial z} + \mu_{eff} \left[\frac{\partial^2 \overline{w_z}}{\partial r^2} + \frac{1}{r} \frac{\partial \overline{w_z}}{\partial r} + \frac{1}{r^2} \frac{\partial^2 \overline{w_z}}{\partial \theta^2} + \frac{\partial^2 \overline{w_\theta}}{\partial z^2} \right] \quad (4)$$

Où $\mu_{effectif} = \mu_{moléculaire} + \mu_{turbulent}$

$$\mu_{turbulent} = C_\mu \rho k^2 / \epsilon$$

L'équation d'état pour un gaz parfait considérant le mélange de plusieurs espèces chimiques s'écrit :

$$\rho = \frac{P}{RT \sum_i (m_i / M_i)} \quad (5)$$

L'équation de l'énergie cinétique de turbulence s'écrit :

$$\rho \left[\overline{v_r} \frac{\partial k}{\partial r} + \frac{\overline{u_\theta}}{r} \frac{\partial k}{\partial \theta} + \overline{w_z} \frac{\partial k}{\partial z} \right] = + \frac{\mu_{eff}}{\sigma_k} \left[\frac{\partial^2 k}{\partial r^2} + \frac{1}{r} \frac{\partial k}{\partial r} + \frac{1}{r^2} \frac{\partial^2 k}{\partial \theta^2} + \frac{\partial^2 k}{\partial z^2} \right] + r(G_k - \rho \epsilon) \quad (6)$$

Le terme G_k représente la génération de l'énergie cinétique de turbulence et s'écrit :

$$G_k = \mu_{turb} \left[2 \left(\left(\frac{\partial \overline{u_\theta}}{\partial \theta} \right)^2 + \left(\frac{\partial \overline{v_r}}{\partial r} \right)^2 + \left(\frac{\partial \overline{w_z}}{\partial z} \right)^2 \right) + \left(\frac{\overline{v_r}}{r} \right)^2 \right. \\ \left. + \left(\frac{\partial \overline{u_\theta}}{\partial r} + \frac{\partial \overline{v_r}}{\partial \theta} \right)^2 + \left(\frac{\partial \overline{u_\theta}}{\partial z} + \frac{\partial \overline{w_z}}{\partial z} \right)^2 + \left(\frac{\partial \overline{v_r}}{\partial z} + \frac{\partial \overline{w_z}}{\partial r} \right)^2 \right] \quad (7)$$

L'équation pour le taux de dissipation s'écrit :

$$\rho \left[\overline{v_r} \frac{\partial \epsilon}{\partial r} + \frac{\overline{u_\theta}}{r} \frac{\partial \epsilon}{\partial \theta} + \overline{w_z} \frac{\partial \epsilon}{\partial z} \right] = \\ + \frac{\mu_{eff}}{\sigma_\epsilon} \left[\frac{\partial^2 \epsilon}{\partial r^2} + \frac{1}{r} \frac{\partial \epsilon}{\partial r} + \frac{1}{r^2} \frac{\partial^2 \epsilon}{\partial \theta^2} + \frac{\partial^2 \epsilon}{\partial z^2} \right] + r \frac{\epsilon}{k} (C_1 G_k - C_2 \rho \epsilon) \quad (8)$$

Les équations (6,7,8) qui décrivent la turbulence utilisent cinq constantes soit $\sigma_k, \sigma_\epsilon, C_1, C_2, C_\mu$. Ces valeurs sont tirées de [14].

2.2.2 Le transfert de chaleur dans la chambre de combustion

L'équation d'énergie moyenne s'écrit :

$$\rho \left[\overline{v_r} \frac{\partial \overline{h}}{\partial r} + \frac{\overline{u_\theta}}{r} \frac{\partial \overline{h}}{\partial \theta} + \overline{w_z} \frac{\partial \overline{h}}{\partial z} \right] = \\ \frac{k^*}{c_p} \left[\frac{\partial^2 \overline{h}}{\partial r^2} + \frac{1}{r} \frac{\partial \overline{h}}{\partial r} + \frac{1}{r^2} \frac{\partial^2 \overline{h}}{\partial \theta^2} + \frac{\partial^2 \overline{h}}{\partial z^2} \right] + Q_{rayonnement} \quad (9)$$

où $Q_{rayonnement}$ est une source ou un puits calculé à partir d'un bilan radiatif utilisant la méthode de zones

2.2.2.1 Le transfert de chaleur par rayonnement

Dans le four de calcination, la source d'énergie provient uniquement de la combustion des matières volatiles et des poussières. Cette source d'énergie n'est pas concentrée comme c'est le cas pour un brûleur, elle est plutôt étalée près de la surface du lit de coke dans la région en aval des tuyères. Étant donné le type de combustion (très longue flamme) et la morphologie du four (long et étroit), le transfert de chaleur par rayonnement devient le principal mode de transport d'énergie.

La méthode de zones a été utilisée pour simuler le rayonnement, il s'agit d'une méthode qui représente fidèlement le transport d'énergie par rayonnement, cependant elle requiert plus de ressources informatiques (mémoire et temps) que les autres. La méthode de zones a été mise au point par Hottel et al. [15], tandis que le programme pouvant appliquer la méthode à une géométrie quelconque a été développé par Haidekker [16].

Pour le rayonnement dans la chambre, on considère un gaz gris avec effet *de dispersion* causé par la présence des poussières de coke. La distribution des coefficients *d'absorption* et *de dispersion* est estimée au préalable à l'aide d'une évaluation approximative de la distribution axiale des concentrations de poussières.

Pour solutionner le rayonnement, on subdivise le volume de contrôle de la

chambre en sous-domaines appelés *zones volumétriques* pour le gaz, et *zones surfaciques* pour les parois internes. Pour chaque zone on suppose la température et les propriétés radiatives constantes.

Le calcul du *transfert radiatif net* utilise les *aires d'échange total* entre les zones surfaciques des parois internes. L'expression est la suivante :

$$Q_{i \rightleftharpoons j} = \overline{S_i S_j} (E_{s,i} - E_{s,j}) \quad (10)$$

Une expression analogue est obtenue entre une zone volumétrique du gaz et une zone surfacique:

$$Q_{i \rightleftharpoons j} = \overline{G_i S_j} (E_{g,i} - E_{s,j}) \quad (11)$$

et entre deux zones volumétriques:

$$Q_{i \rightleftharpoons j} = \overline{G_i G_j} (E_{g,i} - E_{g,j}) \quad (12)$$

avec $Q_{i \rightleftharpoons j}$: transfert de chaleur radiatif en W

$\overline{G_i G_j}$, $\overline{S_i S_j}$, $\overline{G_i S_j}$: aires d'échange total en m^2 (13)

E_i : emittance de la surface ou du gaz i W/m^2

Ainsi le transfert radiatif net entre une zone i en considérant les interactions avec toutes les autres zone s'écrit :

$$\begin{aligned}
Q_{i,net} = & \sum_j \overline{G_i S_j} E_{s,j} + \sum_j \overline{G_i G_j} E_{g,j} \\
& - E_{g,i} \left(\sum_j \overline{G_i S_j} + \sum_j \overline{G_i G_j} \right)
\end{aligned} \tag{14}$$

Les aires d'échange total incorporent l'effet de la géométrie dans l'échange radiatif en exprimant la manière dont chaque zone voit les autres zones de l'enceinte, directement ou par réflexion.

Afin de réduire la tâche de traitement numérique on regroupe en une seule zone plusieurs volumes finis appartenant au modèle de base de la chambre . Le terme $Q_{i,net}$ est un puits ou une source d'énergie pour la zone i ; il apparaîtra dans le terme source $Q_{\text{rayonnement}}$ de l'équation (9). L'algorithme de solution de la méthode de zones utilise la connectivité pour le repérage des zones dans l'enceinte plutôt que d'utiliser un repère classique (cartésien, cylindrique ou curviligne). Cette façon de numéroté les zones facilite l'identification d'une zone qui peut contenir plusieurs volumes finis appartenant au modèle de base.

2.2.2.2 La combustion

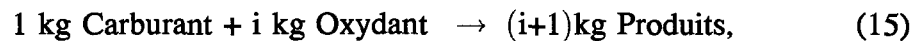
Le modèle de combustion doit prédire la génération de chaleur, mais il vise aussi à déterminer le taux de disparition des matières volatiles, des poussières et, par conséquent la formation des produits des réactions. Pour le modèle 3D existant,

on a supposé que la combustion était contrôlée par la diffusion, c'est-à-dire que l'écoulement contrôle le mélange entre le carburant et l'oxydant [14].

Les hypothèses du modèle de combustion sont :

- Le combustible et le comburant ne peuvent exister au même endroit à aucun instant car ils réagissent dès qu'ils se rencontrent.
- La réaction est complète lorsqu'elle a lieu.
- On néglige les fluctuations des concentrations dues à la turbulence.
- La réaction a une seule étape et est irréversible

Le carburant réagit avec le comburant pour donner des produits dans les proportions :



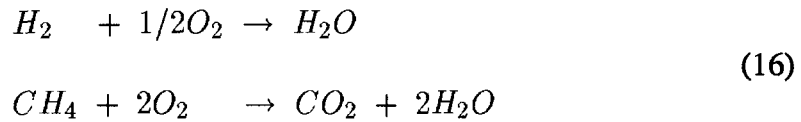
où $i = \frac{M_{ox} a_{ox}}{M_x a_x}$: le rapport stœchiométrique

M_x : la masse molaire de l'espèce chimique x

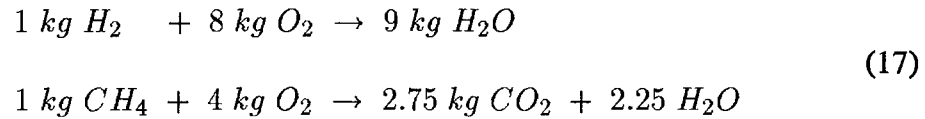
a_x : le coefficient stœchiométrique de l'espèce x

Le modèle de combustion considère la présence des deux plus importantes matières volatiles, soit l'hydrogène (H_2) et le méthane (CH_4). On néglige la présence du goudron ($C_{18}H_{12}$) et des poussières de coke.

Le mécanisme réactionnel sous la forme stœchiométrique est le suivant :



ou sous la forme massique :

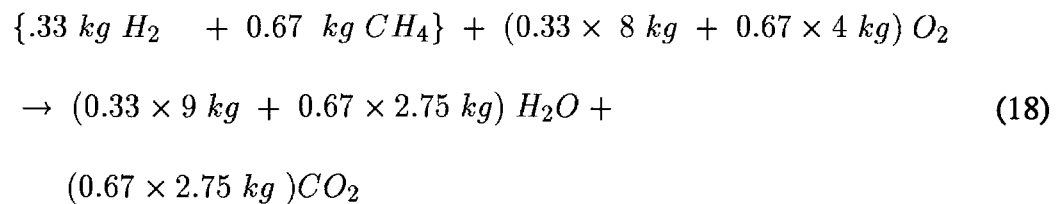


Dans le four, H_2 et CH_4 sont présents dans les proportions suivantes:

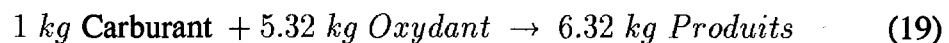
matières volatiles	pourcentage en volume	pourcentage en poids
H_2	80	33
CH_4	20	67

Table 1 Pourcentage des matières volatiles dans le four de calcination

Nous pouvons regrouper les espèces chimiques pour obtenir un mécanisme réactionnel simple exprimé pour un seul carburant. Ainsi nous pouvons écrire :



ou bien :



De la même manière pour la chaleur de combustion on écrit:

$$\begin{aligned} h_c &= (1.2 \times 10^8 \text{ J/kg} \times 0.33)_{H_2} + (5.0 \times 10^7 \text{ J/kg} \times 0.67)_{CH_4} \\ &= 7.31 \times 10^7 \text{ J/kg de carburant} \end{aligned} \quad (20)$$

Le modèle de combustion utilise une variable adimensionnelle représentant la fraction de mélange, définie comme suit:

$$f = \frac{m_f - m_{f,O}}{m_{f,C} - m_{f,O}}, \quad (21)$$

$$\text{où } m_f = m_C - \frac{m_{OX}}{i}$$

$m_{f,C}$ et $m_{f,O}$ sont les valeurs respectives de m_f du carburant et de l'oxydant à l'entrée, et m_C et m_{OX} sont les fraction massiques du carburant et de l'oxydant.

L'équation du transport de la fraction de mélange moyenne \bar{f} s'écrit :

$$\begin{aligned} \rho \left[\bar{v}_r \frac{\partial \bar{f}}{\partial r} + \frac{\bar{u}_\theta}{r} \frac{\partial \bar{f}}{\partial \theta} + \bar{w}_z \frac{\partial \bar{f}}{\partial z} \right] = \\ + \frac{\mu_{eff}}{\sigma_f} \left[\frac{\partial^2 \bar{f}}{\partial r^2} + \frac{1}{r} \frac{\partial \bar{f}}{\partial r} + \frac{1}{r^2} \frac{\partial^2 \bar{f}}{\partial \theta^2} + \frac{\partial^2 \bar{f}}{\partial z^2} \right] \end{aligned} \quad (22)$$

où $\sigma_f = 0.9$, [14].

La solution de l'équation (22) pour \bar{f} fournit une distribution de la fraction de mélange moyenne dans la chambre. Après cette étape on peut déduire les fractions massiques du carburant et de l'oxydant en appliquant le modèle à vitesse de

réaction infiniment rapide suivant :

$$\begin{aligned} \text{si } \bar{f} \leq f_{st} &\Rightarrow m_C = 0.0 \\ m_{OX} &= m_{f,O} \left(1 - \frac{\bar{f}}{f_{st}} \right) \end{aligned} \quad (23)$$

$$\begin{aligned} \text{si } \bar{f} \geq f_{st} &\Rightarrow m_{OX} = 0.0 \\ m_C &= m_{f,C} \left(\frac{\bar{f} - f_{st}}{1 - f_{st}} \right) \end{aligned} \quad (24)$$

$$\text{avec } f_{st} = \left(i \times \frac{m_{f,C}}{m_{OX}} + 1 \right)^{-1}$$

Dans l'équation (19), on a calculé que $i=5.32$. De plus, $m_{f,C} = 1$ partout à la surface du lit de coke où les matières sont libérées et, $m_{f,O} = 0.23$ aux entrées d'air (tuyères et infiltrations), ainsi on obtient que $f_{st} = 0.041$.

À l'aide du graphique ci-dessous on peut visualiser le fonctionnement du modèle de combustion à vitesse de réaction infiniment rapide.

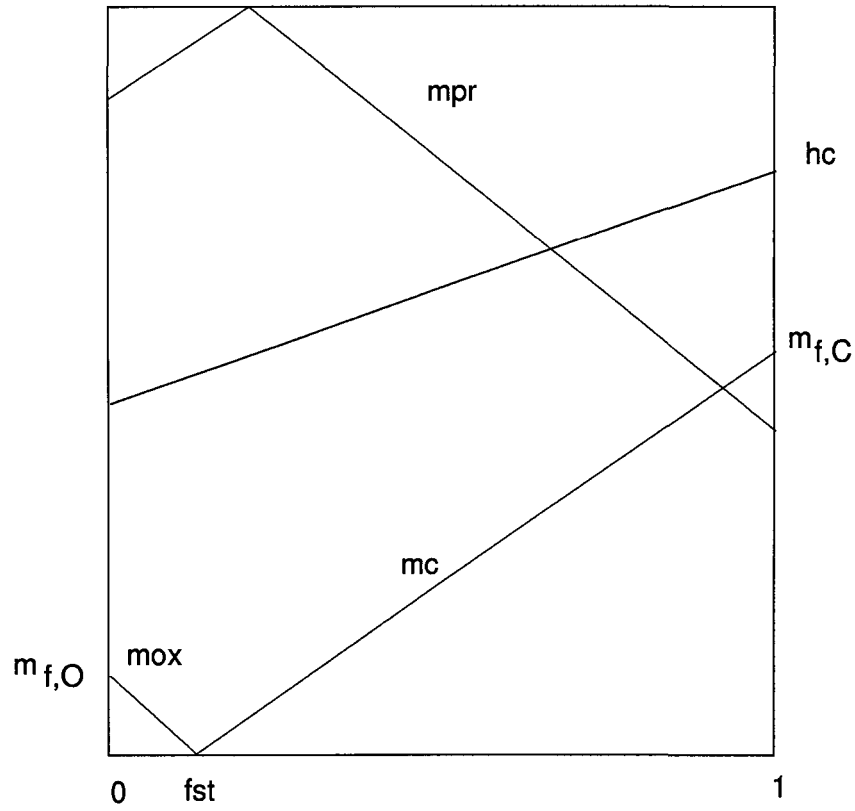


Figure 3 Relation entre \bar{f} et les autres variables du modèle

La distribution de la fraction massique m_{in} du gaz inerte (N_2) dans la chambre peut être obtenue en solutionnant une équation analogue à (22). Elle s'écrit :

$$\rho \left[\bar{v}_r \frac{\partial \bar{m}_{in}}{\partial r} + \frac{\bar{u}_\theta}{r} \frac{\partial \bar{m}_{in}}{\partial \theta} + \bar{w}_z \frac{\partial \bar{m}_{in}}{\partial z} \right] =$$

$$+ \frac{\mu_{eff}}{\sigma_f} \left[\frac{\partial^2 \bar{m}_{in}}{\partial r^2} + \frac{1}{r} \frac{\partial \bar{m}_{in}}{\partial r} + \frac{1}{r^2} \frac{\partial^2 \bar{m}_{in}}{\partial \theta^2} + \frac{\partial^2 \bar{m}_{in}}{\partial z^2} \right] \quad (25)$$

Connaissant les fractions massiques m_C , m_{OX} et m_{in} on peut déduire directement la fraction massique des produits par

$$m_{pr} = 1 - (m_C + m_{OX} + m_{in}),$$

et l'enthalpie massique moyenne devient comme suit :

$$\bar{h} = \int_{T_{ref}}^T (c_{p_C} m_C + c_{p_{OX}} m_{OX} + c_{p_{pr}} m_{pr} + c_{p_{in}} m_{in}) dT + m_C h_C \quad (26)$$

2.3 Le modèle du lit de coke

La partie inférieure du four de calcination est remplie d'un matériel granulaire (coke de pétrole) où la granulométrie peut varier de +0.5 à +325 mailles, dont 50% des particules ont un diamètre <14 mailles [1]. Le déplacement du coke est assuré par l'effet combiné de la rotation et de l'inclinaison du four, donnant une trajectoire hélicoïdale aux particules de coke. Tout au long de son parcours dans le four, le coke de pétrole subit des transformations rhéologiques, principalement au niveau de la viscosité dans la zone de calcination. La diminution de la viscosité dans cette zone augmente le débit du coke localement mais réduit également l'adhérence à la paroi. En conséquence on observe une réduction de l'angle de remplissage (figure 4).

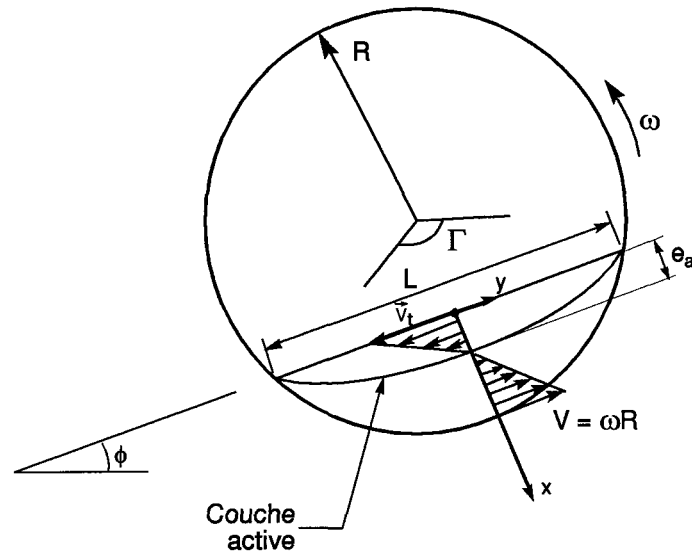


Figure 4 Coupe transversale du lit de coke dans le four

Pour les besoins de la modélisation, on suppose que la surface du volume de contrôle du lit de coke demeure constante. De plus, on considère que l'écoulement hélicoïdal du coke se comporte comme un fluide newtonien. Ainsi on modélise le lit de coke comme un écoulement sujet à la rotation avec un débit à l'entrée. L'imposition d'une condition de débit sert à représenter l'effet de la gravité qui contrôle la descente du matériel granulaire.

Une coupe transversale du lit (figure 4) montre la présence de deux régions d'écoulement distinctes, l'une assez mince près de la surface caractérisée par des vitesses transversales élevées causées par le roulement en cascade du coke, l'autre dans la partie inférieure caractérisée par un gradient de vitesses transversales faible où le coke se déplace en bloc sous l'effet du déplacement de la paroi du four.

Dans le procédé réel, on observe une ségrégation au niveau des particules de coke, c'est-à-dire que les particules plus petites tendent à se grouper et à se déplacer dans une région spécifique vers le centre du volume de contrôle (figure 4). Dans la direction axiale, le coke se déplace lentement avec une composante moyenne de vitesse axiale de l'ordre de 0.025 m/s tandis que dans la direction transversale les vitesses peuvent atteindre 1 m/s près de la surface.

Pour représenter le comportement de l'écoulement des deux régions distinctes, l'utilisation d'une seule viscosité ne permet pas d'obtenir le changement brusque du gradient de vitesse radiale ou le fort cisaillement entre les deux couches (figure 4), à moins d'utiliser des lois de comportement plus complexes compliquant ainsi la solution des équations du mouvement. Couramment pour représenter un tel phénomène on utilise deux viscosités, l'une très faible dans la région active et l'autre très élevée dans la partie inférieure, l'ordre de grandeur des vitesses ainsi que l'épaisseur de la couche active doivent être étalonnés expérimentalement [11].

Pour le four de calcination les valeurs utilisées sont les suivantes:

viscosité cinématique dans la couche active	$1.0 \times 10^{-5} \text{ m}^2/\text{s}$
viscosité cinématique dans la couche inférieure	$1.0 \text{ m}^2/\text{s}$
l'épaisseur de la couche active est de 0.1 m pour un débit de 6.9 kg/s	

L'utilisation du maillage en coordonnées cylindriques pour la chambre engen-

dre une mauvaise représentation du profil de vitesses à la surface. Normalement la vitesse transversale maximale se situe à la surface du lit mais l'utilisation d'un maillage donnant une forme en dents de scie plutôt que lisse à la surface déplace la vitesse maximale beaucoup plus à l'intérieur de la couche active. Le nombre de Prandtl étant élevé pour le lit coke il y a prédominance de la convection dans le transfert de chaleur, d'où l'importance de bien représenter le champ de vitesse à l'interface lit-chambre.

Un repère en coordonnées curvilignes généralisées permet d'obtenir une discrétisation en volumes finis qui épouse la surface du lit. Dans le but d'alléger l'écriture des équations de conservation on présente celles-ci dans la forme de vecteurs [17]. Ainsi les équations s'écrivent :

$$\begin{aligned} \frac{\partial E}{\partial x} + \frac{\partial F}{\partial y} + \frac{\partial G}{\partial z} &= \frac{\partial E_\mu}{\partial x} + \frac{\partial F_\mu}{\partial y} + \frac{\partial G_\mu}{\partial z} \\ E &= \begin{bmatrix} \rho u \\ \rho u + p \\ \rho uv \\ \rho uw \\ \rho uh \end{bmatrix} ; F = \begin{bmatrix} \rho v \\ \rho vu \\ \rho v + p \\ \rho vw \\ \rho hv \end{bmatrix} ; G = \begin{bmatrix} \rho w \\ \rho wu \\ \rho wv \\ \rho w + p \\ \rho wh \end{bmatrix} \\ E_\mu &= \begin{bmatrix} 0 \\ \tau_x \\ \tau_x \\ \tau_x \\ -q_x \end{bmatrix} ; F_\mu = \begin{bmatrix} 0 \\ \tau_y \\ \tau_y \\ \tau_y \\ -q_y \end{bmatrix} ; G_\mu = \begin{bmatrix} 0 \\ \tau_z \\ \tau_z \\ \tau_z \\ -q_z \end{bmatrix} \end{aligned} \quad (27)$$

où

$$\begin{aligned}
\tau_x &= \mu \frac{\partial u}{\partial x}; \tau_y = \mu \frac{\partial v}{\partial y}; \tau_z = \mu \frac{\partial w}{\partial z}; \\
-q_x &= k^* \frac{\partial T}{\partial x}; -q_y = k^* \frac{\partial T}{\partial y}; -q_z = k^* \frac{\partial T}{\partial z}.
\end{aligned} \tag{28}$$

On peut transformer l'équation (27) de l'espace physique (x,y,z) dans l'espace de calcul (ξ, η, ζ), ce qui conduit à l'équation suivante:

$$\begin{aligned}
\frac{\partial E'}{\partial \xi} + \frac{\partial F'}{\partial \eta} + \frac{\partial G'}{\partial \zeta} &= \frac{\partial E'_\mu}{\partial \xi} + \frac{\partial F'_\mu}{\partial \eta} + \frac{\partial G'_\mu}{\partial \zeta} \\
E' &= J^{-1}(\xi_x E + \xi_y F + \xi_z G) \\
F' &= J^{-1}(\eta_x E + \eta_y F + \eta_z G) \\
G' &= J^{-1}(\zeta_x E + \zeta_y F + \zeta_z G) \\
E'_\mu &= J^{-1}(\xi_x E_\mu + \xi_y F_\mu + \xi_z G_\mu) \\
F'_\mu &= J^{-1}(\eta_x E_\mu + \eta_y F_\mu + \eta_z G_\mu) \\
G'_\mu &= J^{-1}(\zeta_x E_\mu + \zeta_y F_\mu + \zeta_z G_\mu)
\end{aligned} \tag{29}$$

Les termes E,F,G,E_μ,F_μ,G_μ ont été définis à l'équation (27). Cependant leurs lois de comportement (τ,q) s'écrivent maintenant sous la forme suivante:

$$\begin{aligned}
\tau_x &= \mu(\xi_x u_\xi + \eta_x u_\eta + \zeta_x u_\zeta); \\
\tau_y &= \mu(\xi_y v_\xi + \eta_y v_\eta + \zeta_y v_\zeta); \\
\tau_z &= \mu(\xi_z w_\xi + \eta_z w_\eta + \zeta_z w_\zeta); \\
q_x &= -k^*(\xi_x T_\xi + \eta_x T_\eta + \zeta_x T_\zeta); \\
q_y &= -k^*(\xi_y T_\xi + \eta_y T_\eta + \zeta_y T_\zeta); \\
q_z &= -k^*(\xi_z T_\xi + \eta_z T_\eta + \zeta_z T_\zeta);
\end{aligned} \tag{30}$$

et J est le jacobien de la transformation défini comme suit :

$$J = \frac{\partial(\xi, \eta, \zeta)}{\partial(x, y, z)} = (x_\xi(y_\eta z_\zeta + y_\zeta z_\eta) - x_\eta(y_\xi z_\zeta - y_\zeta z_\xi) + x_\zeta(y_\xi z_\eta - y_\eta z_\xi)). \tag{31}$$

La génération du maillage [13] utilise la solution d'un système d'équations elliptiques avec des conditions d'orthogonalité pour chaque coupe transversale de l'espace physique (x,y,z) du volume de contrôle du lit de coke

2.4 Le modèle des réfractaires

La coque du four rotatif est constituée de plusieurs couches de matériaux réfractaires et d'une mince enveloppe externe d'acier. L'épaisseur moyenne de la coque est 0.25 m. L'objectif premier du modèle des réfractaires est de déterminer la distribution des températures dans la coque. Cependant le transfert global d'énergie dans la chambre est fortement influencé par la distribution des

températures sur la paroi intérieure. D'où l'importance d'effectuer correctement le transfert énergétique dans les réfractaires en considérant les principales conditions aux limites comme les pertes à l'environnement (rayonnement, convection), le transfert d'énergie par rayonnement et convection de la paroi vers le gaz et, le transfert d'énergie par conduction et convection de la paroi vers le coke. La diversité des sources et puits d'énergie appliqués aux réfractaires, confère au modèle des réfractaires un rôle d'unificateur entre les modèles afin d'assurer la continuité phénoménologique dans la modélisation du four.

Le modèle des réfractaires est présenté sous la forme de l'équation d'énergie appliquée à un solide à couches multiples où le terme de convection représente la rotation des réfractaires. L'effet de rotation peut être simulé en imposant un champ de vitesse sous la forme $u=r\omega, v=0, w=0$ dans le terme de convection, où r est le rayon et $\omega=0.264$ rad/s est la vitesse angulaire de rotation. La rotation a surtout un effet sur le transfert de chaleur entre la paroi et le coke puisque que dans la zone de chauffage le gaz est chaud. Les réfractaires tout au long de leur déplacement accumulent de l'énergie. Ainsi dans une autre section du four, les réfractaires seront en contact avec le coke plus froid et ils cèderont de l'énergie. Par la suite, à la sortie du lit, il seront de nouveau en présence du gaz pour recevoir de l'énergie et ainsi le cycle se poursuit. La situation décrite précédemment ne s'applique qu'à la zone de chauffage tandis que dans la zone de refroidissement c'est la situation inverse qui se présente (figure 5).

L'élaboration du modèle des réfractaires en rotation est simpliste par rapport à l'étape de l'intégration de ce modèle avec les deux autres entités (chambre,lit). Apparaissent alors des problèmes de convergence qui rendent la simulation de ce procédé très difficile. Afin de réduire la sensibilité de la paroi intérieure aux différentes oscillations numériques, il est souhaitable de simuler le transfert de chaleur dans les réfractaires en régime transitoire; l'inertie thermique ainsi créée par le terme d'accumulation d'énergie fera varier plus lentement les températures de la paroi intérieure et facilitera ainsi la convergence.

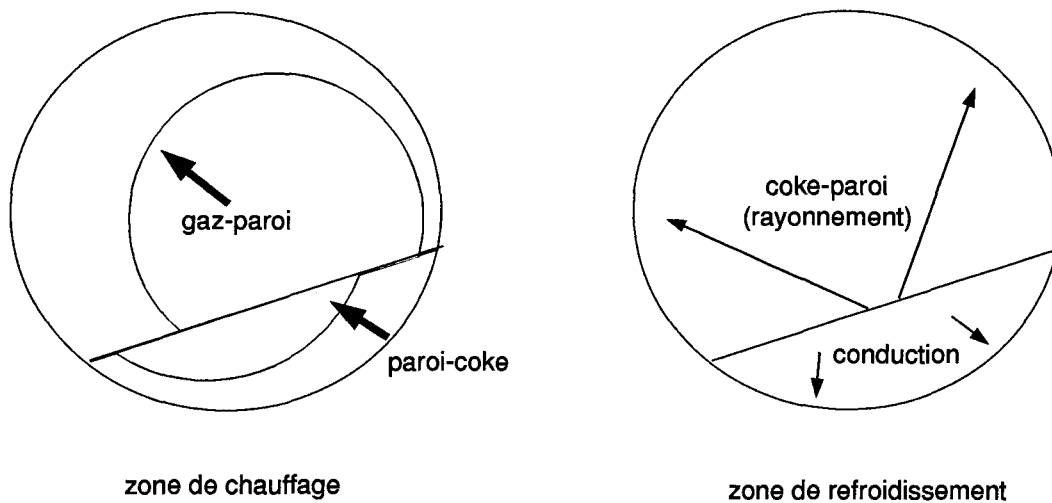


Figure 5 Flux transférés aux réfractaires

Un repère en coordonnées cylindriques est approprié pour la représentation de la discrétisation du volume de contrôle des réfractaires qui est en quelque sorte l'extension du volume de contrôle de la chambre. L'équation d'énergie est

identique à celle élaborée pour la chambre de combustion (9), sauf que le terme source $Q_{\text{rayonnement}}$ ne s'applique pas.

3

Le modèle de combustion amélioré

3.1 Les hypothèses du modèle

Le modèle de combustion basé sur le concept de la fraction de mélange, tel que décrit précédemment, satisfait bien le bilan énergétique dans la chambre de combustion. Cependant la distribution des sources d'énergie provenant de la combustion n'est pas tout à fait réaliste, occasionnant un apport de chaleur au lit qui peut être trop élevé ou trop bas. La fraction de mélange représente tous les réactifs dans une seule variable, même si les chaleurs de combustion diffèrent grandement entre les réactifs. Ainsi l'énergie dégagée par la combustion représente plutôt une valeur moyenne de tous les réactifs qui brûlent. Ce modèle altère le taux de chauffage, puisque dans la zone des tuyères la combustion de l'hydrogène doit être favorisée par rapport à la combustion d'autres matières volatiles moins énergétiques. Dans le four de calcination, les matières volatiles brûlent non uniformément tout au long de la surface du lit de coke. La distribution des sources d'énergie est contrôlée par le profil de température du lit de coke et la différence des chaleurs de combustion entre les réactifs. Outre la vérification du bilan énergétique sur la chambre, il s'avère difficile de valider le modèle de la fraction de mélange. Celui-ci en effet ne permet pas de différencier les espèces chimiques de sorte qu'il devient impossible de reproduire les fractions

massiques expérimentales des espèces chimiques, notamment à la sortie des gaz où des mesures pour l'hydrogène, le méthane, l'oxygène, l'azote et le dioxyde de carbone sont disponibles.

Un four utilisant un brûleur conventionnel, fonctionne généralement en excès d'air, et presque tout le combustible est consommé. Inversement dans le cas du four de calcination, le système produit plus de combustible qu'il n'en a besoin, et presque tout le comburant est consommé. Ainsi selon Khalil [14], le modèle de combustion exprimé en terme de la fraction de mélange ne convient pas à la combustion du four de calcination. Le principal avantage d'utiliser la fraction de mélange, est qu'elle permet d'exprimer le modèle de combustion à l'aide d'une seule équation de conservation, ce qui simplifie passablement la procédure de solution.

Ainsi donc, dans le four de calcination, il est important d'analyser le comportement de chaque matière volatile et des poussières de coke. Chaque réactif a des caractéristiques distinctes de dégagement, de transport et de combustion. Le nouveau modèle de combustion contient une équation de conservation pour chaque espèce chimique, c'est-à-dire l'hydrogène(H_2), le méthane(CH_4), le goudron($C_{18}H_{12}$), l'oxygène(O_2), le dioxyde de carbone (CO_2), la vapeur d'eau (H_2O) et les poussières de coke (C). La fraction massique de l'azote(N_2) est obtenue directement par le complément de la somme des autres fractions massiques d'espèces chimiques considérées. Dans ce modèle on considère que

les poussières de coke sont suffisamment petites pour être traitées comme une concentration chimique. De plus on suppose qu'elles sont dégagées et transportées comme un gaz sans aucun transfert d'énergie cinétique entre le gaz et les poussières.

Le mécanisme réactionnel considéré est le suivant :

avec l'hydrogène:	$H_2 + \frac{1}{2} O_2 \rightarrow H_2O + \Delta h_{H_2}$
avec le goudron:	$C_{18}H_{12} + 21 O_2 \rightarrow 6H_2O + 18CO_2 + \Delta h_{C_{18}H_{12}}$
avec le methane:	$CH_4 + 2 O_2 \rightarrow 2H_2O + CO_2 + \Delta h_{CH_4}$
avec le coke:	$C + O_2 \rightarrow CO_2 + \Delta h_C$

Les hypothèses sont les suivantes:

- La réaction est complète
- On néglige les fluctuations des concentrations due à la turbulence
- La réaction a une seule étape et est irréversible

Dans le four de calcination, l'oxydant provient de quatre jets en rotation avec le four. Les tuyères sont alignées et légèrement décentrées par rapport à l'axe du four, tandis que les matières volatiles sont libérées de la surface du

lit transversalement pour s'infiltrer dans l'écoulement principal. La zone de dégagement couvre une bonne partie de la surface du lit, soit une longueur approximative de 35 m. Dans la région des tuyères le flux de masse d'air est beaucoup plus important que celui des matières volatiles libérées à la surface du lit. L'analyse hydrodynamique de l'écoulement dans cette région du four montre une séparation, c'est-à-dire que l'air se retrouve dans une couche supérieure tandis que les matières volatiles sont confinées près de la surface du lit. Cependant, la stratification n'est pas parfaite, et il existe une mince couche de mélange entre l'air et les combustibles (les matières volatiles et les poussières). Il devient difficile alors d'appliquer les modèles de combustion développés pour les brûleurs conventionnels, où la qualité du mélange doit être supérieure[14] .

L'épaisseur de la couche de mélange est contrôlée par la turbulence, celle-ci favorisant l'interpénétration des deux couches de gaz. Dans ce type de four presque tout l'oxygène est consommé, et l'on retrouve des concentrations importantes de matières volatiles à la sortie de la chambre. D'où la nécessité de considérer la cinétique de réaction, pour tenir compte de la disponibilité de l'oxygène.

Pour représenter le type de combustion rencontré dans le four de calcination, on propose la formulation du *taux de réaction* pour chaque combustible, c'est-à-dire que l'on introduit un *facteur multiplicatif* à l'équation cinétique d'Arrhénius pour tenir compte de l'accentuation du mélange dû à la turbulence. L'effet de

la température est important dans le taux de réaction de certains combustibles. Dans le cas de la combustion des poussières de coke, l'effet de la température est important, puisque les poussières peuvent coexister avec l'air sans toutefois qu'il n'y ait combustion, dû aux conditions défavorables. C'est d'ailleurs le cas dans la section du refroidissement en amont des tuyères, où les températures du gaz sont trop basses et il ne peut y avoir combustion.

L'expression du *taux de réaction augmenté* est la suivante:

$$R_x = -C_x \rho_{gaz}^2 [x]^a [O_2]^b e^{-\frac{E}{RT}} \tau_s^{-1} ; \left[\frac{kg_x}{s \ m^3} \right] \quad (32)$$

où $\tau_s = \frac{k}{\epsilon} [s]$ est l'échelle temporelle de diffusion et C_x est une constante du modèle pour le combustible.

L'interprétation de l'influence de τ_s sur le taux de réaction serait que:

Plus la valeur de τ_s est petite, davantage les réactifs seront intimement mélangés localement

Dans certaines régions de la chambre, l'effet de la turbulence sur la combustion peut être réduit, cependant il peut y avoir quand même combustion.

À l'étape de la solution numérique, des problèmes de convergence surviennent dus à l'interdépendance des fractions massiques et aux fluctuations de la température dans le terme exponentiel. Ainsi pour l'hydrogène, le méthane et le goudron, l'expression du taux de réaction (32) sera modifiée en négligeant le

terme exponentiel. Cependant, dans le cas des poussières le terme exponentiel sera conservé pour contrôler la combustion dans les régions à basses températures de la chambre.

3.2 Les équations de conservation

L'équation moyenne de transport pour toutes les espèces chimiques s'écrit:

$$\rho \left[\bar{v}_r \frac{\partial \bar{M}}{\partial r} + \frac{\bar{u}_\theta}{r} \frac{\partial \bar{M}}{\partial \theta} + \bar{w}_z \frac{\partial \bar{M}}{\partial z} \right] = + \frac{\mu_{eff}}{\sigma_f} \left[\frac{\partial^2 \bar{M}}{\partial r^2} + \frac{1}{r} \frac{\partial \bar{M}}{\partial r} + \frac{1}{r^2} \frac{\partial^2 \bar{M}}{\partial \theta^2} + \frac{\partial^2 \bar{M}}{\partial z^2} \right] + \bar{R} \quad (33)$$

où

$$\bar{M} = \begin{bmatrix} \frac{\bar{m}_{H_2}}{\bar{m}_{CH_4}} \\ \frac{\bar{m}_{C_{18}H_{12}}}{\bar{m}_{O_2}} \\ \frac{\bar{m}_{H_2O}}{\bar{m}_{CO_2}} \end{bmatrix} ; \bar{R} = \begin{bmatrix} \frac{\bar{R}_{H_2}}{\bar{R}_{CH_4}} \\ \frac{\bar{R}_{C_{18}H_{12}}}{\bar{R}_{O_2}} \\ \frac{\bar{R}_{H_2O}}{\bar{R}_{CO_2}} \end{bmatrix}$$

\bar{m}_i : la fraction massique moyenne de l'espèce i, $\left[\frac{kg_x}{kg_{total}} \right]$

\bar{R}_i : le taux de réaction de l'espèce i, $\left[\frac{kg_x}{sm^3} \right]$

Le taux de réaction de l'hydrogène (H_2) s'exprime comme :

$$\overline{R_{H_2}} = -20 \rho^2 \overline{m_{H_2}}^{1.0} \overline{m_{O_2}}^{1.0} \tau_s^{-1} \quad (34)$$

Comme il a été discuté précédemment, on laisse tomber le terme exponentiel pour éviter les problèmes de convergence, étant donné la combustion vigoureuse générée par l'hydrogène. Selon [2], les exposants qui affectent les fractions massiques ne sont pas disponibles dans la littérature, ainsi faute de mieux on pose l'unité. La valeur de la constante dans la relation (34) est strictement dépendante du calcinateur, puisque l'on a modifié la forme originale de l'équation d'Arrhénius.

Le taux de réaction du méthane (CH_4) s'exprime comme :

$$\overline{R_{CH_4}} = -30 \rho^2 [\overline{m_{CH_4}}]^{0.7} [\overline{m_{O_2}}]^{0.8} \tau_s^{-1} \quad (35)$$

Comme auparavant, on laisse tomber le terme exponentiel pour éviter les problèmes de convergence. Les exposants qui affectent les fractions massiques sont obtenus de Dryer et Glassman (1973). La valeur de la constante dans la relation (35) est strictement dépendante du calcinateur, puisque l'on a modifié la forme originale de l'équation d'Arrhénius.

Pour le taux de réaction du goudron ($C_{18}H_{12}$), on a:

$$\overline{R_{C_{18}H_{12}}} = -10 \rho^2 [\overline{m_{C_{18}H_{12}}}]^{1.0} [\overline{m_{O_2}}]^{0.5} \tau_s^{-1} \quad (36)$$

Les valeurs des exposants et de l'énergie d'activation sont données par Dervede et al (1986). La valeur de la constante dans la relation (36) est strictement dépendante du calcinateur, puisque l'on a modifié la forme originale de l'équation d'Arrhénius.

Quant aux poussières de coke, leur combustion est donnée par:

$$\overline{R_C} = -15 \rho^2 [\overline{m_C}]^{0.66} [\overline{m_{O_2}}]^{0.6} \tau_s^{-1} e^{-\frac{7200}{RT}} \quad (37)$$

Les valeurs des exposants et de l'énergie d'activation sont données par Castonguay (1987). La valeur de la constante dans la relation (37) est strictement dépendante du calcinateur, puisque l'on a modifié la forme originale de l'équation d'Arrhénius. Bien que la relation (37) soit applicable sur l'ensemble du volume de contrôle de la chambre, il faut définir une barrière de réaction puisque les poussières de coke brûlent à partir d'un niveau de température.

Le taux de réaction de l'oxygène (O_2) est donné en fonction de la disparition des matières volatiles et des poussières de coke:

$$\overline{R_{O_2}} = \overline{R_{H_2}} \bullet i_{H_2} + \overline{R_{CH_4}} \bullet i_{CH_4} + \overline{R_{C_{18}H_{12}}} \bullet i_{C_{18}H_{12}} + \overline{R_C} \bullet i_C \quad (38)$$

où $i_x = \frac{M_{O_2} a_{O_2}}{M_x a_x}$; est le rapport stœchiométrique de la réaction du réactif (x) avec l'oxygène (O_2), M_x est la masse molaire de l'espèce (x) et a_x le coefficient

stoéchiométrique de l'espèce (x) dans la réaction. Ainsi pour tous les réactifs, les rapports stoéchiométriques sont définis dans le tableau suivant:

$i_{H_2} = \frac{M_{O_2} a_{O_2}}{M_{H_2} a_{H_2}} = \frac{32 \bullet \frac{1}{2}}{2 \bullet 1} = 8$
$i_{CH_4} = \frac{M_{O_2} a_{O_2}}{M_{CH_4} a_{CH_4}} = \frac{32 \bullet 2}{16 \bullet 1} = 4$
$i_{C_{18}H_{12}} = \frac{M_{O_2} a_{O_2}}{M_{C_{18}H_{12}} a_{C_{18}H_{12}}} = \frac{32 \bullet 21}{228 \bullet 1} = 2.95$
$i_C = \frac{M_{O_2} a_{O_2}}{M_C a_C} = \frac{32 \bullet 1}{12 \bullet 1} = 2.67$

Pour les produits des réactions, soit la vapeur d'eau (H₂O) et le dioxyde de carbone (CO₂), leurs taux de réaction dépendent de ceux des réactifs:

$$\begin{aligned} \overline{R_{H_2O}} &= -\left(\overline{R_{H_2}} \bullet \frac{kg_{H_2O}}{kg_{H_2}} + \overline{R_{CH_4}} \bullet \frac{kg_{H_2O}}{kg_{CH_4}} + \overline{R_{C_{18}H_{12}}} \bullet \frac{kg_{H_2O}}{kg_{C_{18}H_{12}}}\right) \\ &= -(\overline{R_{H_2}} \bullet 9 + \overline{R_{CH_4}} \bullet 2.25 + \overline{R_{C_{18}H_{12}}} \bullet 0.47) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \overline{R_{CO_2}} &= -\left(\overline{R_{CH_4}} \bullet \frac{kg_{CO_2}}{kg_{CH_4}} + \overline{R_{C_{18}H_{12}}} \bullet \frac{kg_{CO_2}}{kg_{C_{18}H_{12}}} + \overline{R_C} \bullet \frac{kg_{CO_2}}{kg_C}\right) \\ &= -(\overline{R_{CH_4}} \bullet 2.75 + \overline{R_{C_{18}H_{12}}} \bullet 3.474 + \overline{R_C} \bullet 3.67) \end{aligned}$$

La densité pondérée du volume gazeux chargé de particules s'obtient par:

$$\rho = \left(\frac{\overline{m}_c}{\rho_c} + \frac{(1 - \overline{m}_c)}{\rho_{gaz}} \right)^{-1} \quad (39)$$

où :

$$\rho_{gaz} = \frac{P}{RT \left(\frac{\overline{m}_{H_2}}{M_{H_2}} + \frac{\overline{m}_{CH_4}}{M_{CH_4}} + \frac{\overline{m}_{C_{18}H_{12}}}{M_{C_{18}H_{12}}} + \frac{\overline{m}_{O_2}}{M_{O_2}} + \frac{\overline{m}_{H_2O}}{M_{H_2O}} + \frac{\overline{m}_{CO_2}}{M_{CO_2}} + \frac{\overline{m}_{N_2}}{M_{N_2}} \right)} \quad (40)$$

Après incorporation des valeurs numériques, l'équation (39) devient:

$$\rho = \left[\frac{\overline{m}_c}{800} + \frac{(1 - \overline{m}_c)}{\frac{101 \times 10^3}{8206T \left(\frac{\overline{m}_{H_2}}{2.0} + \frac{\overline{m}_{CH_4}}{16.0} + \frac{\overline{m}_{C_{18}H_{12}}}{228} + \frac{\overline{m}_{O_2}}{32} + \frac{\overline{m}_{H_2O}}{18} + \frac{\overline{m}_{CO_2}}{64} + \frac{\overline{m}_{N_2}}{28} \right)}} \right]^{-1} \quad (41)$$

Par ailleurs, l'équation d'énergie de l'enthalpie moyenne s'écrit:

$$\begin{aligned} \rho \left[\overline{v}_r \frac{\partial \overline{h}}{\partial r} + \frac{\overline{u}_\theta}{r} \frac{\partial \overline{h}}{\partial \theta} + \overline{w}_z \frac{\partial \overline{h}}{\partial z} \right] = \\ \frac{k^*}{c_p} \left[\frac{\partial^2 \overline{h}}{\partial r^2} + \frac{1}{r} \frac{\partial \overline{h}}{\partial r} + \frac{1}{r^2} \frac{\partial^2 \overline{h}}{\partial \theta^2} + \frac{\partial^2 \overline{h}}{\partial z^2} \right] \\ + Q_{rayonnement} + Q_{combustion} \end{aligned} \quad (42)$$

Le terme source $Q_{combustion}$ représente l'énergie provenant de la combustion des matières volatiles et des poussières de coke. Il prend la forme suivante:

$$Q_{combustion} = - [\Delta h_{H_2} \bullet \overline{R_{H_2}} + \Delta h_{CH_4} \bullet \overline{R_{CH_4}} + \Delta h_{C_{18}H_{12}} \bullet \overline{R_{C_{18}H_{12}}} + \Delta h_C \bullet \overline{R_C}] \quad (43)$$

où Δh_x : chaleur de combustion de chaque réactif $\left[\frac{J}{kg_x} \right]$
 $\overline{R_x}$: taux de disparition de (x) $\left[\frac{kg_x}{sm^3} \right]$

Selon [2], la chaleur de combustion de chaque réactif est définie dans le tableau suivant:

hydrogène (H ₂)	$\Delta h_{H_2} = 120 \times 10^6 \left[\frac{J}{kg_{H_2}} \right]$
méthane (CH ₄)	$\Delta h_{CH_4} = 50 \times 10^6 \left[\frac{J}{kg_{CH_4}} \right]$
goudron (C ₁₈ H ₁₂)	$\Delta h_{C_{18}H_{12}} = 39 \times 10^6 \left[\frac{J}{kg_{C_{18}H_{12}}} \right]$
poussières de coke (C)	$\Delta h_C = 32.26 \times 10^6 \left[\frac{J}{kg_C} \right]$

Dans l'équation moyenne d'énergie (42), l'enthalpie massique moyenne est définie comme suit:

$$\overline{h} = (c_{p_{H_2}} \overline{m_{H_2}} + c_{p_{CH_4}} \overline{m_{CH_4}} + c_{p_{C_{18}H_{12}}} \overline{m_{C_{18}H_{12}}} + c_{p_C} \overline{m_C} + c_{p_{O_2}} \overline{m_{O_2}} + c_{p_{H_2O}} \overline{m_{H_2O}} + c_{p_{CO_2}} \overline{m_{CO_2}} + c_{p_{N_2}} \overline{m_{N_2}}) \bullet T ; \left[\frac{J}{kg_{total}} \right] \quad (44)$$

où c_{p_x} est la chaleur massique de l'espèce chimique (x) en $\left[\frac{J}{kg_x K} \right]$. La valeur pour chaque réactif a été obtenue de [2], et est donnée dans le tableau ci-dessous:

espèce chimique	J/kg K
$c_{p_{H_2}}$	15841
$c_{p_{CH_4}}$	4592
$c_{p_{C_{18}H_{12}}}$	3308
c_{p_C}	750
$c_{p_{O_2}}$	1002
$c_{p_{H_2O}}$	1989
$c_{p_{CO_2}}$	1076
$c_{p_{N_2}}$	1200

La conductivité thermique moyenne dans l'équation (42) est obtenue par une simple moyenne arithmétique des conductivités thermiques des différentes espèces chimiques présentes dans le réacteur:

$$k^* = [k_{H_2}^* + k_{CH_4}^* + k_{C_{18}H_{12}}^* + k_C^* + k_{O_2}^* + k_{H_2O}^* + k_{CO_2}^* + k_{N_2}^*] / 8.0 ; \left[\frac{W}{mK} \right] \quad (45)$$

À une température locale, la conductivité thermique varie très peu entre les espèces chimiques. De plus, l'effet du transfert de chaleur par conduction dans le gaz est considéré comme négligeable, par rapport aux autres modes de transmission de la chaleur comme le rayonnement et la convection

Quant à la chaleur massique moyenne, elle est obtenue en faisant:

$$c_p = c_{p_{H_2}} \overline{m_{H_2}} + c_{p_{CH_4}} \overline{m_{CH_4}} + c_{p_{C_{18}H_{12}}} \overline{m_{C_{18}H_{12}}} + c_{p_C} \overline{m_C} + c_{p_{O_2}} \overline{m_{O_2}} + c_{p_{CO_2}} \overline{m_{CO_2}} + c_{p_{N_2}} \overline{m_{N_2}} + c_{p_{H_2O}} \overline{m_{H_2O}} ; \left[\frac{J}{kg_{total}K} \right] \quad (46)$$

3.3 Le dégagement des matières volatiles et des poussières de coke

Les matières volatiles sont libérées de la surface du lit. Pour chaque matière volatile on doit évaluer un débit massique et l'imposer par la suite comme une condition frontière au modèle d'écoulement. Pour ce faire, on évalue les débits de matières volatiles en fonction du débit de coke à l'entrée. Les travaux de Charette et Kocaefe [12], ont permis d'établir la quantité de matières volatiles dégagées par unité de masse de coke vert initial. L'étude expérimentale a montré que pour un échantillon de 100g de coke vert, chauffé avec un taux de chauffage équivalent à celui du four de calcination, les masses moyennes des matières volatiles libérées sont les suivantes:

hydrogène (H ₂)	1.9 g
méthane (CH ₄)	2.7 g
goudron (C ₁₈ H ₁₂)	6.4 g
total=	11 g / 100 g de coke vert

L'utilisation de ce résultat sur le four réel, nous permet de trouver que pour un débit nominal de 20 t/h ou 5.56 kg/s de coke vert à l'entrée, on aura 0.62

kg/s de matières volatiles qui seront libérées de la surface du lit de coke avec la répartition suivante:

hydrogène (H_2)	0.11 kg/s
méthane (CH_4)	0.15 kg/s
goudron ($C_{18}H_{12}$)	0.36 kg/s
total =	0.62 kg/s de matières volatiles

Ces valeurs sont atteintes à 1200 °C, mais les quantités dégagées en cours de chauffage ne sont pas linéaires en fonction de la température. Il faut donc tenir compte de la distribution des températures du lit pour déterminer les quantités qui sont émises dans les différentes parties du four. Le goudron est libéré très tôt, puis ce sont le méthane et l'hydrogène avec chevauchement des zones de dégagement.

Selon Charette et Kocaefe [12], les intervalles moyens des températures de dégagement des matières volatiles sont les suivants:

hydrogène (H_2)	650 - 1200 °C
méthane (CH_4)	550 - 1100 °C
goudron ($C_{18}H_{12}$)	570 - 1175 °C

En plus des matières volatiles, on considère que la vapeur d'eau (H_2O) se libère de la surface du lit dans une zone étroite à l'entrée du coke vert, la quantité dégagée étant de 0.5 kg/s.

La captation des poussières par l'écoulement du gaz s'effectue principalement de deux façons. Les tuyères en rotation traversent le lit de coke à chaque rotation et entraînent avec elles des poussières qui retombent par la suite. Durant leur chute les plus petites poussières pénètrent dans les jets d'air des tuyères pour être projetées plus loin en aval. Ce premier mode de captation semble être le plus important, selon des observations visuelles faites à l'aide d'une caméra placée à une extrémité du four. Ce phénomène de capture est presque impossible à simuler dans le contexte du présent modèle du four. Le second mode de captation proviendrait de la combinaison de mouvements tourbillonnaires près de la surface du lit et de l'entraînement de petites poussières par le dégagement des matières volatiles. Le modèle de Ke Wen Li (1974) permet de simuler le second mode de captation. Ce chercheur a obtenu une corrélation qui permet d'évaluer un débit massique de poussières en fonction de certaines caractéristiques du four rotatif. Le modèle utilise la vitesse axiale moyenne du gaz à la surface du lit élevée à la quatrième puissance. L'application de ce modèle dans le contexte du four de calcination fournit un débit massique de poussières à la surface du lit beaucoup trop faible, si on compare les concentrations de poussières calculées avec les mesures obtenues à la sortie du gaz de la chambre.

Devant les difficultés de modélisation de l'entraînement des poussières, on a choisi d'estimer leur débit en se basant sur le pourcentage moyen de poussières récupérées à la sortie du gaz de la chambre. Généralement on récupère environ

10% du débit de coke vert à l'entrée, ainsi pour un débit de coke vert nominal de 20 t/h ou 5.56 kg/s on injectera 0.556 kg/s de poussières provenant de la surface du lit, dans une région au niveau des tuyères et en leur aval.

Le tableau suivant montre les localisations des zones de dégagement des matières volatiles, des poussières et de la vapeur d'eau.

position(m)	NO. tranche	remarque	reactifs libérés
3.868	1	sortie du coke	
7.736	2		
11.604	3		
15.472	4		$H_2 + \text{poussieres}$
19.34	5		$H_2 + \text{poussieres}$
19.59	6	tuyère NO. 1	$H_2 + \text{poussieres}$
20.56	7		$H_2 + \text{poussieres}$
20.81	8	tuyère NO. 2	$H_2 + \text{poussieres}$
21.78	9		$H_2 + \text{poussieres}$
22.04	10	tuyère NO. 3	$H_2 + \text{poussieres}$
23.0	11		$H_2 + \text{poussieres}$
23.25	12	tuyère NO. 4	$H_2 + \text{poussieres}$
24.22	13		$H_2 + \text{poussieres}$
26.04	14		$H_2 + \text{poussieres}$
29.06	15		$H_2 + \text{poussieres}$
31.482	16		$H_2 + \text{poussieres}$
33.902	17		$H_2 + \text{poussieres}$
36.323	18		$H_2 + \text{poussieres} + C_{18}H_{12}$
38.744	19		$H_2 + \text{poussieres} + C_{18}H_{12}$
41.164	20		$H_2 + \text{poussieres} + C_{18}H_{12}$

43.585	21		$C_{18}H_{12} + CH_4$
46.006	22		$C_{18}H_{12} + CH_4$
48.427	23		$C_{18}H_{12} + CH_4$
50.847	24		$C_{18}H_{12} + CH_4$
53.268	25		CH_4
55.688	26		CH_4
58.109	27		H_2O
61.03	28		H_2O
61.53	29		H_2O
62.03	30	entrée du coke ou sortie du gaz	H_2O

4

La solution numérique

4.1 Le logiciel PHOENICS

PHOENICS est un logiciel pour simuler des phénomènes en dynamique des fluides, notamment:

- les variations dans le temps
- les variations en une, deux ou trois dimensions
- la turbulence
- la compressibilité
- le transfert de chaleur
- la réaction chimique
- le diphasé
- les géométries complexes

PHOENICS est beaucoup plus qu'un logiciel, c'est un environnement de travail, qui contient trois entités. Premièrement, il y a un interpréteur syntaxique qui traite les fichiers où sont codés en un langage spécifique les tâches de simulation à accomplir; de plus si l'utilisateur le désire, le codage d'une simulation peut être assisté par une interface graphique. Deuxièmement, il y a le résolveur qui accomplit la simulation tout en informant continuellement l'utilisateur du déroulement

de la simulation. Troisièmement, il y a un post-processeur graphique, qui permet à l'utilisateur d'interroger la base de données des résultats afin d'analyser graphiquement les résultats de la simulation.

Le résolveur a une architecture qui est en partie ouverte, c'est-à-dire que l'utilisateur peut introduire son propre code source en Fortran en des points d'entrée spécifiques. Dans le cadre de la modélisation du four de calcination, cette flexibilité nous permet d'introduire une autre méthode de solution du rayonnement et un modèle de combustion plus adapté au four.

4.2 La discrétisation des équations par la méthode des volumes finis

La méthode des volumes finis [18] consiste à solutionner un ensemble d'équations algébriques obtenues en intégrant les équations de conservation sur un volume fini ou cellule. Cette cellule est un sous-domaine obtenu par la discrétisation du volume de contrôle. Sur chaque cellule, on suppose que la variable solutionnée est uniforme; ainsi il faut utiliser des fonctions d'interpolations pour tenir compte de l'influence des cellules voisines.

Pour les termes qui dépendent du temps, toutes les propriétés du fluide sont supposées constantes et indépendantes de la position à l'intérieur de la cellule. Ainsi l'intégration sur la cellule de $\frac{\partial \rho \phi}{\partial t}$, donnera l'expression suivante, $\frac{(\rho \phi)_{\text{nouveau}} - (\rho \phi)_{\text{ancien}}}{t_{\text{nouveau}} - t_{\text{ancien}}}$ pour chaque volume fini.

Pour les termes convectifs, toutes les variables sont considérées uniformes sur les faces de la cellule, excepté pour les vitesses où l'on utilise une valeur différente pour chaque face de la cellule. Les vitesses aux faces sont déterminées en imposant pour chaque face la vitesse du noeud voisin le plus proche en amont de la face. Par exemple, si u_e est la composante de vitesse de la face EST de la cellule P et si A_e est l'aire de la face EST, le flux de masse traversant la face EST de la cellule est donné par:

$$\begin{aligned} \rho_P u_e A_e \text{ pour } u_e > 0 \\ \rho_E u_e A_e \text{ pour } u_e < 0 \end{aligned} \quad (47)$$

où E est l'indice représentant la cellule voisine à l'EST.

Pour une variable ϕ , le produit du flux de masse par cette variable s'écrit:

$$\begin{aligned} \rho_P u_e A_e \phi_P \text{ pour } u_e > 0 \\ \rho_E u_e A_e \phi_E \text{ pour } u_e < 0 \end{aligned} \quad (48)$$

Le coefficient d'échange dans le terme diffusif est évalué aux frontières communes (EST, OUEST, NORD, SUD, HAUT, BAS) entre les volumes finis utilisant une moyenne harmonique ou arithmétique. Par exemple, le flux diffusif d'une variable ϕ à travers la face EST d'une cellule P en coordonnées cylindriques, utilisant une moyenne arithmétique pour le coefficient d'échange, s'écrit:

$$\frac{A_e \frac{(\Gamma_P + \Gamma_E)}{2} (\phi_E - \phi_P)}{r_e (x_E - x_P)} \quad (49)$$

D'une manière générale les équations discrétisées ont la forme algébrique suivante:

$$\phi_P = \frac{a_E\phi_E + a_O\phi_O + a_N\phi_N + a_S\phi_S + a_H\phi_H + a_B\phi_B + a_T\phi_T + S}{a_E + a_O + a_N + a_S + a_H + a_B + a_T + a_P} \quad (50)$$

où ϕ est une variable dépendante appartenant aux modèles du four, qui peut être l'une ou l'autre des variables suivantes: $u, v, w, p, k, \epsilon, h, H_2, CH_4, C_{18}H_{12}, C, O_2$; les indices P, E, O, N, S, H et B représentent les localisations des variables dans le voisinage de la cellule P; l'indice T représente le temps. De plus, le coefficient a_E est déterminé par la différentiation en amont et s'écrit:

$$a_E = \frac{A_e \frac{(\Gamma_P + \Gamma_E)}{2}}{r_e(x_E - x_P)}, \text{ avec } u_e > 0 ;$$

$$a_E = \rho_E |u_e| A_e + \frac{A_e \frac{(\Gamma_P + \Gamma_E)}{2}}{r_e(x_E - x_P)}, \text{ avec } u_e < 0 . \quad (51)$$

Les termes S et a_P expriment l'influence d'une source donnée.

Soit NX, NY, NZ le nombre de cellules dans chaque direction, alors pour chaque variable dépendante ϕ , on a $NX \times NY \times NZ$ équations algébriques. Pour un modèle complet, on a $NX \times NY \times NZ \times (\text{VARIABLES DÉPENDANTES})$ équations à solutionner. PHOENICS solutionne ces équations d'une manière itérative, en réduisant au fur et à mesure l'imbalance entre les deux cotés de chaque équation. Le processus itératif est complexe, incluant de multiples mises à jour des valeurs fortement couplées.

PHOENICS traite une condition frontière comme un terme source de la variable dépendante, la source est assignée au centre de la cellule plutôt que

directement au mur. Ainsi faut-il raffiner la discrétisation près du mur pour réduire l'erreur.

4.3 La discrétisation des volumes de contrôle

En plus des équations, il faut également discrétiser chaque volume de contrôle qui est associé à chaque modèle. Cette étape consiste à prendre le volume de contrôle et le subdiviser en volume finis ou cellules. Le four de calcination contient trois volumes de contrôle, soit la chambre de combustion, le lit de coke et les réfractaires. Pour chacun de ces volumes de contrôle on aura une discrétisation, sauf pour la chambre de combustion, qui nécessite deux discrétisations différentes pour le même modèle. En effet le transport d'énergie par rayonnement utilise une discrétisation tandis que l'écoulement du gaz, la combustion et les autres modes de transport d'énergie dans le gaz utilisent une autre discrétisation.

Dans la chambre, la première discrétisation s'applique aux équations de Navier-Stokes, de combustion et de transport d'énergie par convection et conduction, cette discrétisation est définie selon un repère en coordonnées cylindriques. La distribution des cellules est non uniforme avec 29 subdivisions dans la direction radiale, 84 subdivisions dans la direction angulaire et 30 subdivisions dans la direction axiale, pour un total de 73080 volumes finis. La non-uniformité provient des contraintes imposées par le procédé lui-même, comme la géométrie de la tuyère, les emplacements des tuyères, l'angle de remplissage

du lit de coke et les géométries des entrées d'air primaire, d'air secondaire et des trous d'infiltration. Pour construire cette discrétisation, qui peut être complexe en fonction des exigences du procédé, on utilise un utilitaire graphique développé spécifiquement pour la chambre; celui-ci permet d'élaborer et de visualiser interactivement pas-à-pas le développement de la discrétisation en spécifiant les principaux paramètres de la géométrie du four, tel qu'énumérés précédemment. La figure 6 montre certains paramètres de la géométrie du four qui influencent la discrétisation à l'intérieur d'un menu d'entrée des données, tandis que la figure 7 visualise les paramètres. La figure 8 montre la discrétisation faite à l'aide de l'interface selon une coupe transversale avec la distribution dans la direction axiale du four.

Minimum radius for the whole cylinder (meter) ?	0.001
Maximum radius for the whole cylinder (meter) ?	0.990
Tuyere's radius (meter) ?	0.097
Tuyere's offset (meter) ?	0.297
Number of different position for the tuyere ?	4
Angle for the first position of the tuyere (degree) ?	180.000
Radius of opening at loading end (meter) ?	0.685
Filling angle (degree) ?	100.0
Distribution along z axis ?	5,3.868,1,0.25,1,0.97,1,0.25,1,0.97,1,0.25,1,0.97,1,0.25,1,0.97,15,2.42067,2,0.5
<div style="display: flex; justify-content: space-around; align-items: center;"> <div style="border: 1px solid black; padding: 5px; text-align: center;">Visualisation !!!</div> <div style="border: 1px solid black; padding: 5px; text-align: center;">O.K !!!</div> </div>	

Figure 6 Les paramètres de la géométrie du four de calcination

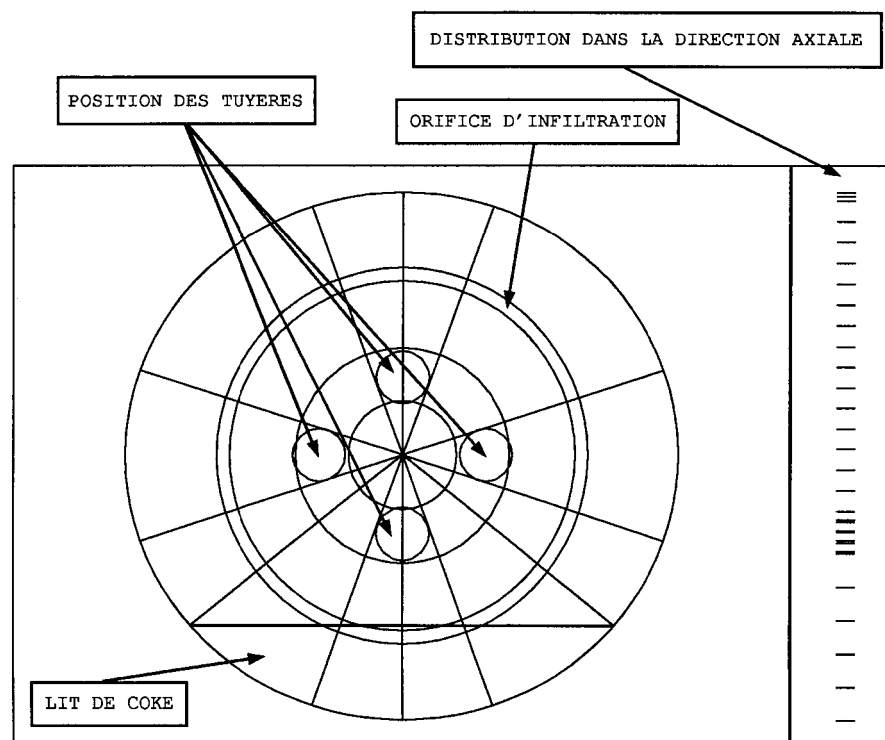
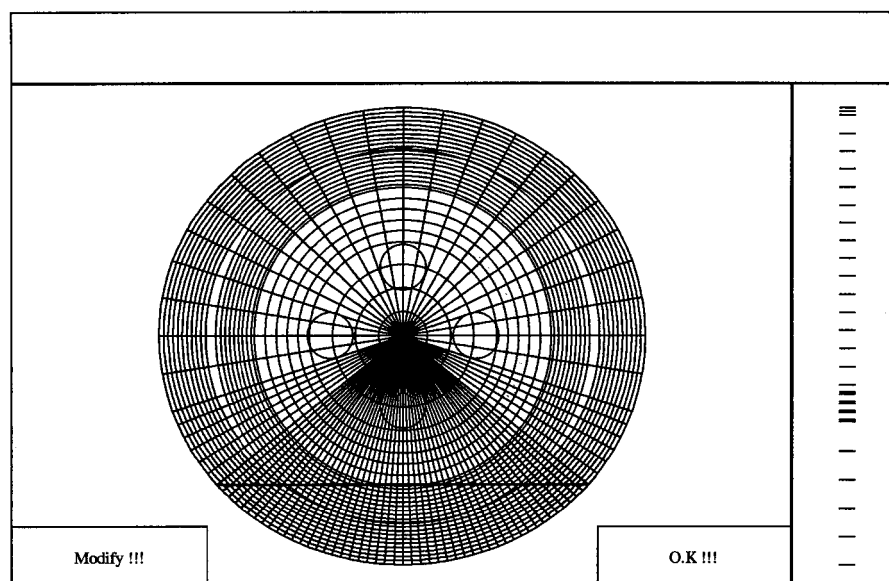


Figure 7 La visualisation des paramètres de la géométrie du four



***Figure 8 La première discrétisation de la chambre
pour l'écoulement, la combustion et l'énergie***

De plus, avec le même interface on construit la seconde discrétisation utilisée pour le rayonnement dans la chambre. Chaque élément de cette discrétisation est appelé une *zone*, celle-ci étant constituée d'un regroupement de plusieurs volumes finis créés dans la première discrétisation du modèle de la chambre. Les zones sont définies par rapport à aucun repère spécifique, mais plutôt en terme d'une connectivité pour faciliter le regroupement. La discrétisation comprend 18 zones transversales pour chacune des 30 subdivisions dans la direction axiale donnant au total 540 zones (figure 9). La distribution des subdivisions axiales est identique à celle de la première discrétisation (figure 8)

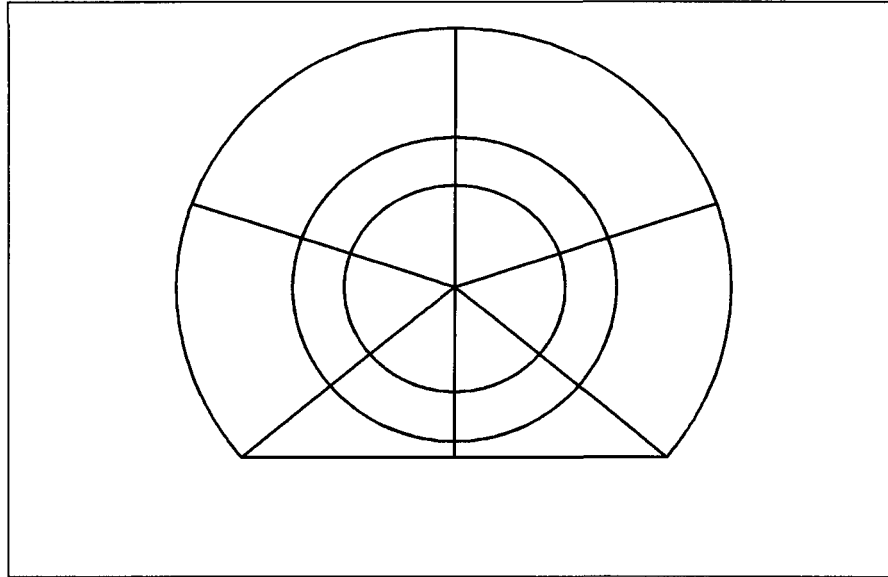


Figure 9 La seconde discrétisation de la chambre pour le rayonnement

Dans les réfractaires, la discrétisation s'applique à l'équation de transport d'énergie par conduction avec l'effet de la rotation, cette discrétisation étant définie par rapport à un repère en coordonnées cylindriques. La distribution est non uniforme avec 5 subdivisions dans la direction radiale, 84 subdivisions dans la direction angulaire et 30 subdivisions dans la direction axiale, pour un total de 12600 volumes finis (figure 10). Cette discrétisation est un prolongement de la première discrétisation de la chambre (figure 8).

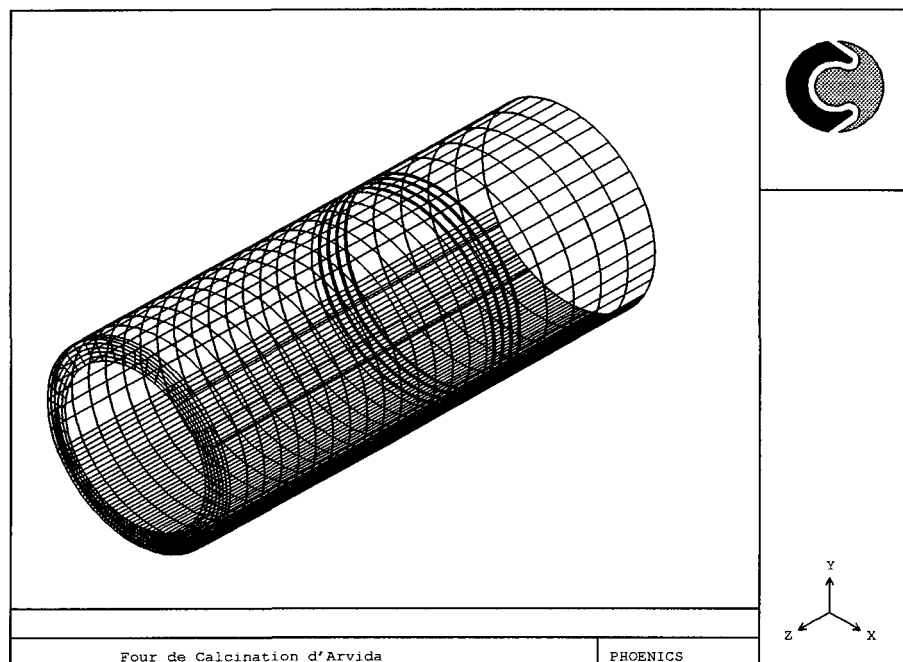


Figure 10 La discrétisation des réfractaires.

Dans le lit de coke, la discrétisation s'applique aux équations de Navier-Stokes et de transport d'énergie. Elle est définie par rapport à un repère en coordonnées curvilignes généralisées. Cette discrétisation comprend 900 volumes finis pour chacune des 60 tranches dans la direction axiale, donnant au total 54000 volumes finis (figure 11). La discrétisation est donnée par un algorithme créant des volumes finis adaptés à la forme du lit de coke et qui respectent la condition d'orthogonalité.

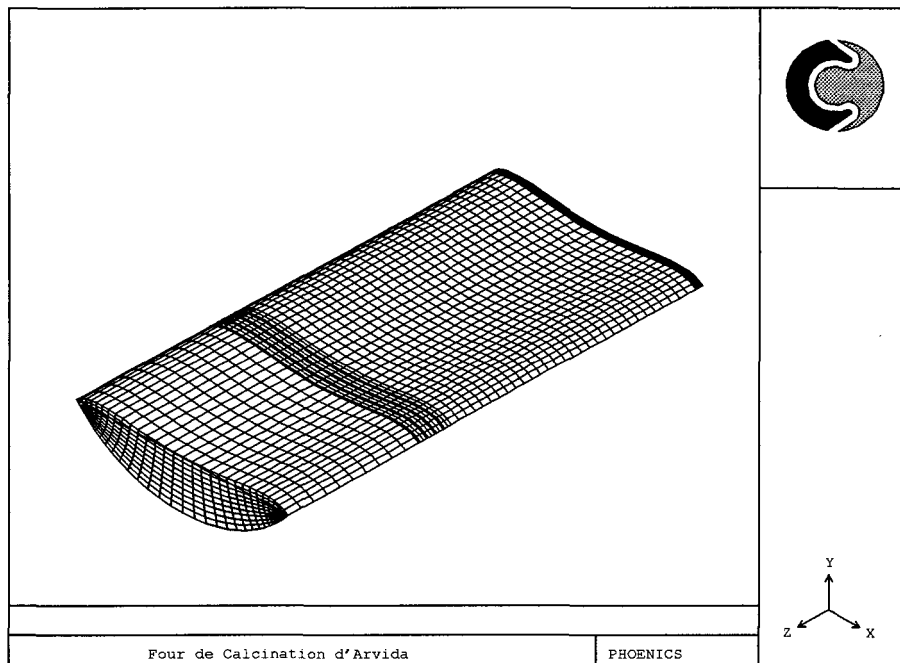


Figure 11 La discrétisation du lit de coke

La détermination du nombre de volumes finis dans chaque discrétisation dépend de certaines considérations. Par exemple, prenons le cas de la discrétisation de la chambre pour l'écoulement et l'énergie où la limite inférieure de la chambre est délimitée par la surface du lit. Un repère en coordonnées cylindriques ne peut épouser exactement la surface; on ne pourra obtenir qu'une forme approximative en bloquant des volumes finis contigus à la surface. Cette façon de faire génère des aspérités en dents de scie qui ne peuvent être complètement atténuées. Aussi faut-il déterminer le nombre de volumes finis en faisant un compromis entre la précision désirée des résultats dans une région et le temps

de calcul requis. En appliquant ce principe, on obtient au total 140220 volumes finis pour toutes les discrétisations.

4.4 La simulation

La procédure de simulation est complexe, puisqu'au début du démarrage, soit pour les trente premières itérations, il faut introduire chacun des modules graduellement afin d'éviter des problèmes de convergence qui autrement sont incontrôlables. Chaque module est un code PHOENICS ou autre qui est autonome, représentant l'une des quatre parties suivantes: la chambre, le rayonnement, les réfractaires et le lit de coke. La figure 12 schématise la procédure de simulation du four de calcination. Dans la processus, le module de la chambre est le *maître*, puisqu'il lance lui-même l'exécution des trois autres modules selon une procédure établie.

À l'*itération 0*, le modèle de la chambre est initialisé à partir d'un champ de vitesses obtenu dans une simulation antérieure. Cette procédure est nécessaire à la fois pour réduire le temps de calcul et pour s'assurer d'obtenir un régime d'écoulement turbulent stable avant l'introduction de l'énergie. Pendant les vingt itérations suivantes, on démarre la combustion.

À l'*itération 20*, on introduit le transfert de chaleur par rayonnement dans la chambre, tenant compte des échanges radiatifs entre le lit de coke, le gaz et à la paroi intérieure des réfractaires. Ce module reçoit les températures et retourne

les flux de chaleur. Pendant les dix itérations suivantes, on débute l'interaction avec le modèle des réfractaires. Dans les réfractaires, on solutionne le transfert de chaleur par conduction et convection, le modèle reçoit des flux et retourne des températures à la paroi intérieure.

À l'*itération 30*, le modèle du lit est initialisé à partir d'un champ de vitesses obtenues dans une simulation antérieure. Ensuite, on solutionne le transfert de chaleur par conduction et convection dans le lit. Le modèle reçoit des flux qui sont appliqués à la surface du lit, et retourne un champ de températures applicable au même endroit. Pour chaque itération suivante jusqu'à l'*itération 80*, les modèles de la chambre (combustion et rayonnement) , des réfractaires et du lit sont solutionnés.

À chaque fois que l'on active un module du modèle global, on perturbe le processus de convergence de celui-ci. La 20 ième et la 30 ième itération sont des endroits propices à l'activation de nouveaux modules, de sorte que les perturbations peuvent être résorbées rapidement. Généralement, après 80 itérations le modèle global atteint une convergence qui est acceptable.

La gestion du transfert d'informations entre les modules est la responsabilité de chaque module. Cependant une règle simple de transfert d'informations est utilisée, à savoir que *le donneur transfère toujours un fichier dans le format de traitement du receveur*, c'est-à-dire que le donneur effectue toujours la conversion

des données qui s'impose avant de créer le fichier.

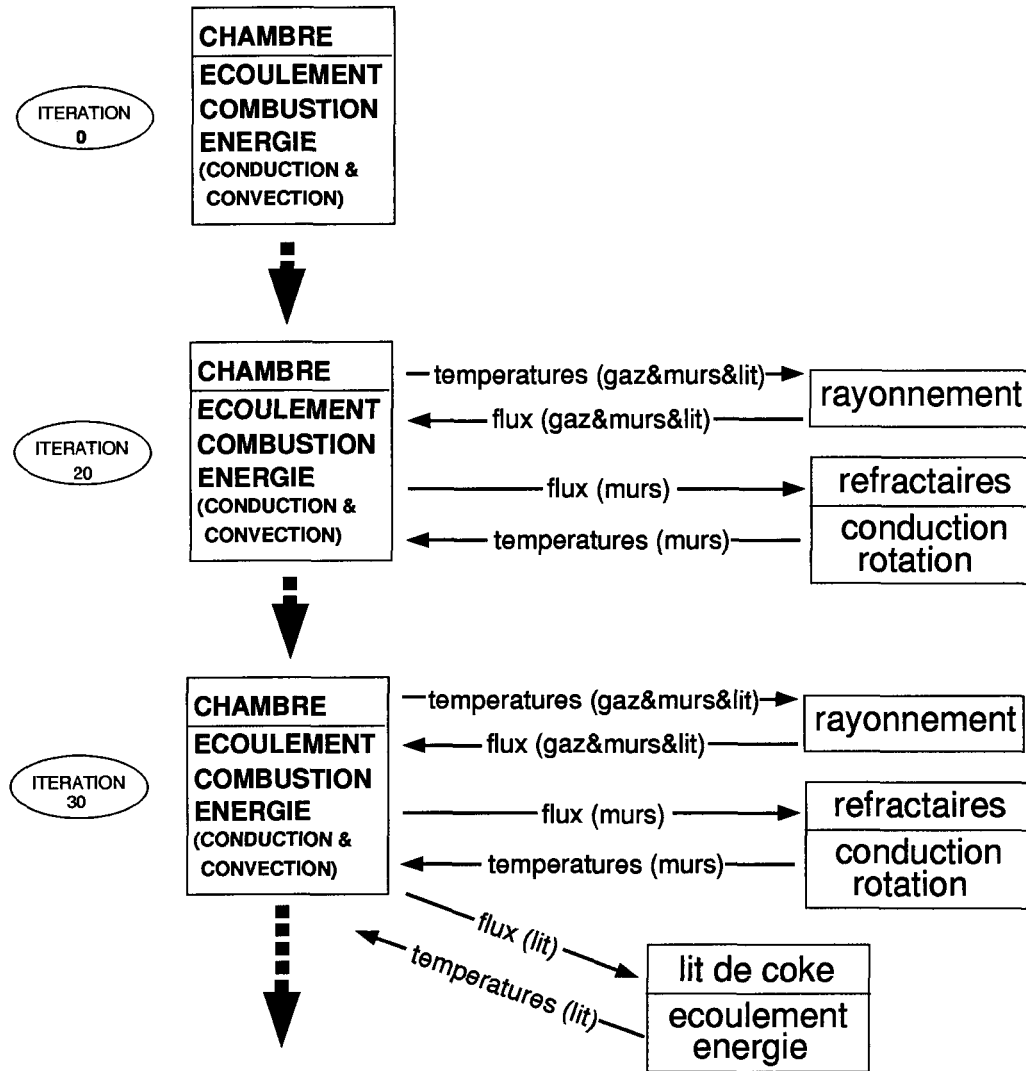


Figure 12 Le schéma de fonctionnement du simulateur

La procédure de simulation utilise deux modes de relaxation, soit linéaire ou dite à “faux pas de temps”, puisque les changements brusques génèrent des

oscillations qui conduiraient à la divergence. Un des éléments les plus sensibles du système est le module des réfractaires, puisque celui-ci réagit rapidement aux fluctuations provenant des flux de chaleur calculés à la paroi interne par le module du rayonnement. Afin d'éviter ce comportement, on solutionne le module des réfractaires en régime transitoire même si les autres module sont en régime stationnaire. Le terme d'accumulation d'énergie amortit les changements brusques dans les flux de chaleur et, au fur et à mesure que la simulation se déroule, les fluctuations disparaissent et les réfractaires tendent vers un état stationnaire.

Le temps de calcul pour une simulation complète de 100 itérations est d'environ 7 heures sur un poste de travail HP 9000 serie 730; avec un ratio (temps de calcul / [temps de calcul + entrée-sortie] = 0.80). Cependant ce ratio peut être augmenté en optimisant le transfert de fichiers entre les modules. L'espace requis en mémoire vive par les modules executables est de 62 Moctets. Cependant l'exécution est séquentielle de sorte que 32 Mo est suffisant pour effectuer une simulation avec les discrétisations discutées précédemment. L'espace requis sur un disque dur est d'environ 150 Moctets pour le stockage complet des programmes et des bases de données .

5

Résultats et discussion

Les figures 13 à 39 ont été obtenues à partir d'une simulation basée sur les paramètres opératoires de la campagne de mesures de la journée du 11 octobre 1990 (four de calcination no. 2 de SECAL, Arvida). Les figures 13 à 17 se rapportent au lit de coke, 18 à 38 à la chambre et la figure 39 aux réfractaires.

5.1 Le lit de coke

La figure 13 montre une vue en perspective du lit de coke, où l'on peut voir la distribution des températures du lit près des réfractaires. Ce choix a été fait pour conserver l'effet tridimensionnel de la figure. Les températures maximales sont observées à partir de la tuyère no. 2 jusqu'*en aval* de la tuyère no. 4 (les tuyères sont numérotées selon la convention de l'écoulement du gaz; ainsi la tuyère no. 4 est située du côté de la sortie du gaz ou de l'entrée du coke).

La figure 14 montre une vue en perspective d'une section axiale du lit. On y voit une distribution de températures selon une coupe axiale au centre du lit. En se déplaçant verticalement, on observe que l'intérieur du lit est plus froid d'environ 30 degrés par rapport aux couches supérieures et inférieures, pour cette section du chauffage. Dans la partie supérieure, le gradient de températures est plus important et est localisé dans la couche active du lit (figure 16). Le mouvement transversal

de la couche active va transporter l'énergie de la surface du lit vers la couche inférieure où les vitesses sont moins importantes. De plus, la partie inférieure reçoit de l'énergie supplémentaire des réfractaires sous l'effet dynamique de la rotation. Dans la section du chauffage *en aval* des tuyères (convention du gaz), les réfractaires réchauffent le lit de coke plus froid, tandis que dans l'autre section du four les réfractaires reçoivent de l'énergie du lit beaucoup plus chaud. Selon un bilan énergétique du lit (tableau 5), on trouve que l'échange net entre les réfractaires et le lit est légèrement positif. En d'autres termes, ce que le lit de coke reçoit des réfractaires dans la section du chauffage, il le redonne aux réfractaires dans la section du refroidissement. Le *coefficient global* de transfert de chaleur entre les réfractaires et le lit a été estimé entre 0.5 et 1.0 $[W/m^2\text{ }^\circ C]$ à partir de Ferron[19].

La figure 15 montre la comparaison entre les températures du lit calculées par le modèle et celles mesurées[1] (p 250–251) dans l'usine par Perron et Desgroseilliers. La courbe des valeurs calculées est obtenue en utilisant une moyenne pondérée des températures du lit dans la direction transversale. Les différences entre températures calculées et mesurées dans la zone de 24 m à 40 m sont probablement causées par un effet combiné très complexe du dégagement et de la combustion des matières volatiles, que même le modèle de combustion amélioré ne peut considérer. Par contre, nous observons certaines similitudes à plusieurs endroits:

- pour la zone de 0 m à 24 m, la montée en température calculée satisfait les deux seuls points expérimentaux disponibles.
- la température maximale calculée est inférieure de 10 degrés à la température mesurée (celle-ci étant décalée de 6 mètres en amont).
- à la sortie du coke, l'écart de température est inférieur à 50 degrés.

La figure 16 montre l'écoulement du lit de coke dans la direction transversale. On remarque deux parties distinctes, l'une plutôt mince à la surface (couche active) où les vitesses varient et sont élevées, l'autre beaucoup plus épaisse dans la partie inférieure où le gradient de vitesses est presque nul (écoulement piston). Notons que les vitesses maximales se produisent à la surface du lit, conformément aux mesures de Gauthier[11]. L'épaisseur de la couche active est imposée dans le modèle en utilisant une corrélation empirique fournie par le même auteur. De plus on peut comparer la vitesse maximale calculée de 1.12 m/s avec celle obtenue à partir d'une autre corrélation fournie par le même auteur soit 1.42 ± 0.4 m/s. Cette figure montrant l'écoulement dans la direction transversale est obtenue en prenant une coupe transversale de l'écoulement 3D. L'écoulement est engendré par la rotation du mur à 2.5 r/min soit une vitesse tangentielle de 0.27 m/s avec la surface du lit considérée libre (avec glissement). Le régime d'écoulement est supposé laminaire. Appuyant notre raisonnement sur des similitudes, nous estimons la viscosité cinématique ν de l'écoulement piston de l'ordre de 1.5 m²/s. La diffusité thermique α du coke étant de l'ordre de 10⁻⁷ m²/s, le rapport

de la viscosité cinématique ν à la diffusité thermique α , c'est à dire le nombre de Prandtl, est très grand. On en déduit l'importance de la convection par rapport à la conduction pour le transfert de chaleur dans le lit de coke.

La figure 17 montre l'écoulement du lit de coke dans la direction axiale. L'écoulement dans cette direction se comporte comme un écoulement régulier avec un effet marqué du cisaillement à la paroi, réduisant ainsi les vitesses du coke près des réfractaires. Les vitesses maximales se trouvent à la surface. Le modèle actuel utilise une viscosité unique dans la direction axiale: il ne considère pas l'effet de fluidisation dans la zone de dégagement des matières volatiles. Le temps de résidence moyen calculé du coke est de 34 min.

5.2 La chambre de combustion

La figure 18 montre une distribution des températures (*en kelvins*) dans la chambre selon une coupe axiale au centre du volume de contrôle et perpendiculaire à la surface du lit. La région froide à droite de la figure est causée par l'infiltration d'air provenant de plusieurs ouvertures (fenêtres, trou de caméra et joint de rotation) et par l'air forcé provenant du brûleur à sa position fermée. Cette région s'étend jusqu'en aval des tuyères où se trouve l'entrée de l'air tertiaire. Au centre de la figure dans la partie inférieure se trouve la zone de dégagement des matières volatiles où débute la combustion. Une seconde région froide est

présente près de la surface du lit de coke à l'extrême gauche de la figure, où se trouve l'entrée du coke vert.

La figure 19 montre une distribution des températures (*en kelvins*) selon une coupe transversale au niveau de la tuyère no. 4. Dans la partie supérieure de la figure, on observe une région froide qui est causée par l'entrée de l'air tertiaire. La distribution des températures à la limite inférieure correspond aux températures de dégagement des matières volatiles à la surface du lit de coke. La région chaude entre la surface du lit et l'entrée de l'air tertiaire représente la zone de combustion des matières volatiles. L'asymétrie des contours de températures est causée par la rotation du cylindre.

La figure 20 montre le champ de vitesses selon une coupe transversale au niveau de la tuyère no. 4. Dans la partie supérieure, on voit la sortie du jet d'air de la tuyère no. 4. Près de la paroi à gauche, on observe une diminution des vitesses causée par l'effet de contre-courant de la rotation du cylindre. Près de la paroi à droite, on observe le phénomène inverse, puisque que l'écoulement se déplace dans le même sens que la rotation, la paroi contribuant à augmenter sensiblement la vitesse.

La figure 21 montre une distribution des températures (*en kelvins*) selon une coupe transversale en aval de la tuyère no. 4 (à 29.06 m de l'entrée du gaz). Comparativement à la figure 19, on note que la partie supérieure est beaucoup

plus chaude, étant donné la combustion des matières volatiles. L'asymétrie des contours de températures continue de s'accroître par ailleurs. La figure 22 met en évidence la cause de ce phénomène: la présence d'une zone de recirculation. Le vortex est tridimensionnel et s'étire dans la direction axiale de la chambre, avec un sens de rotation opposé à celui de la paroi de la chambre.

La figure 23 montre une distribution des températures (*en kelvins*) selon une coupe transversale en aval de la tuyère no. 4 (à 36.32 m de l'entrée du gaz). La zone de recirculation en bas est toujours présente, et continue de s'allonger en se dirigeant vers le lit de coke (figure 24). On remarque que le vortex a perdu de l'ampleur mais il continue d'influencer la distribution des températures. Notons que la forme pyramidale des contours de températures au centre du lit de coke (figure 23), est causée par la rencontre d'écoulements en sens inverse près de la surface du lit de coke (figure 24). Ces écoulements de surface affectent le mélange des matières volatiles libérées de la surface du lit et provoquent une combustion donnant les contours de températures représentés à la figure 23.

La figure 25 montre une distribution des températures (*en kelvins*) selon une coupe transversale en aval de la tuyère no. 4 (à 46 m de l'entrée du gaz, soit au 3/4 de la chambre). On observe un début d'homogénéisation des températures dans la partie supérieure avec encore la présence de la forme pyramidale des contours au centre du lit et une plus grande symétrie dans les contours de températures qui s'explique par la disparition de la recirculation (figure 26). À ce niveau dans la

chambre, l'écoulement parabolique se développe axialement. L'effet combiné de l'écoulement et de la température des réactifs entraîne une combustion plus intense dans les extrémités à la surface du lit. Il est difficile de confirmer ce phénomène visuellement ou par des mesures dans la chambre de combustion. Cette intense combustion dans les coins s'étend sur près de la moitié de la longueur de la chambre.

La figure 27 montre une distribution des températures (*en kelvins*) selon une coupe transversale en aval de la tuyère no. 4 (à 58.11 m de l'entrée du gaz). On observe une progression de l'homogénéisation des températures dans la partie supérieure avec les pyramides au centre du lit et les zones de combustion dans les extrémités à la surface du lit.

La figure 28 montre le champ de vitesses selon une coupe transversale au niveau de la tuyère no. 4 (à 58.11 m de l'entrée du gaz). L'uniformité des températures observée à la figure 27 est le reflet de l'écoulement obtenu à cette position dans la chambre. On observe qu'il n'existe plus d'écoulement contraire près des parois. De plus, les vecteurs vitesses des matières volatiles libérées à la surface du lit sont presque verticales, ce qui est une indication de la pénétration des matières volatiles plus haut dans la chambre.

La figure 29 montre la distribution des températures (*en kelvins*) dans les orifices de sortie du gaz, où la température moyenne calculée est de 1014.0 °C.

Par ailleurs les températures mesurées[1] dans la chambre de transfert du gaz sont respectivement de 980 °C pour le thermocouple no. 1 et de 990 °C pour le pyromètre à succion (Perron et Desgroseilliers p 247). Notons que les mesures ont été prises dans la chambre de transfert en arrière de la chute d'alimentation du coke vert, située à environ 0.5 m en aval de la sortie du gaz considérée dans le domaine de calcul, ce qui expliquerait l'écart de température. Idéalement, il aurait fallu étendre le volume de contrôle à une partie de la chambre de transfert.

La figure 30 montre le champ de vitesses tout juste avant les orifices de sortie du gaz. On voit clairement l'étranglement de l'écoulement qui s'engage dans les orifices où la vitesse peut atteindre 15 m/s. La région bloquée entre les orifices représente la chute d'alimentation du coke vert.

La figure 31 montre une distribution du taux de disparition de H_2 en $\left[\frac{kg_{H_2}}{s}\right]$ dans la chambre selon une coupe axiale au centre du volume de contrôle et perpendiculaire à la surface du lit. Cette figure met en évidence une intense combustion (*boule de feu*) de H_2 près de la tuyère no. 4. Ce phénomène a été observé expérimentalement dans le four de calcination. À la sortie du gaz, la fraction massique moyenne calculée de H_2 est de 0.0114 comparativement à la fraction massique moyenne mesurée qui est de 0.011.

La figure 32 montre une distribution du taux de disparition des poussières de coke en $\left[\frac{kg_C}{s}\right]$ dans la chambre selon la même coupe axiale au centre du volume de

contrôle. On observe que la combustion des poussières de coke se produit à peu près avec la même intensité jusqu'à une position avancée dans la chambre. Les poussières étant lourdes, elles se déplacent principalement dans la partie inférieure de la chambre. À la sortie du gaz, le débit massique calculé des poussières est de 0.23 kg/s comparativement au débit moyen mesuré de 0.20 kg/s.

La figure 33 montre une distribution de la fraction massique de O_2 en $\left[\frac{kg_{O_2}}{kg_{TOTAL}} \right]$ dans la chambre selon la même coupe axiale au centre du volume de contrôle. À la sortie du gaz, la fraction massique moyenne calculée de O_2 est de 0.033 comparativement aux fractions massiques mesurées qui varient entre 0.005 et 0.028 .

La figure 34 montre une distribution de la fraction massique de CO_2 en $\left[\frac{kg_{O_2}}{kg_{TOTAL}} \right]$ dans la chambre selon la même coupe axiale au centre du volume de contrôle. Le CO_2 est produit par les réactions avec le $C_{18}H_{12}$, le CH_4 et les poussières, ces réactifs brûlent assez loin en aval des tuyères ce qui explique la formation plus rapide dans les zones près de la sortie des gaz. La fraction massique moyenne calculée à la sortie de CO_2 est de 0.12 comparativement aux fractions massiques mesurées qui varient entre 0.094 et 0.101 .

La figure 35 montre une distribution de la fraction massique de H_2O en $\left[\frac{kg_{H_2O}}{kg_{TOTAL}} \right]$ dans la chambre selon la même coupe axiale au centre du volume de contrôle. On peut voir que la vapeur d'eau est libérée très tôt dans la zone du

chauffage en raison du niveau élevé d'humidité contenu dans le coke vert.

La figure 36 montre une distribution de la fraction massique de CH_4 en $\left[\frac{kg_{\text{CH}_4}}{kg_{\text{TOTAL}}} \right]$ dans la chambre selon la même coupe axiale au centre du volume de contrôle. La fraction massique moyenne calculée à la sortie de CH_4 est de 0.017 comparativement aux fractions massiques mesurées qui varient entre 0.019 et 0.035 . On remarque que les fractions massiques de CH_4 sont plus élevées vers la sortie de la chambre, puisqu'à cet endroit près de la surface du lit, l'oxygène est plus rare (voir figure 33).

La figure 37 montre une distribution de la fraction massique de $\text{C}_{18}\text{H}_{12}$ en $\left[\frac{kg_{\text{C}_{18}\text{H}_{12}}}{kg_{\text{TOTAL}}} \right]$ dans la chambre selon la même coupe axiale au centre du volume de contrôle. Pour la même raison qui a été invoquée pour le CH_4 , l'oxygène étant plus rare dans cette région de la chambre, les fractions massiques de $\text{C}_{18}\text{H}_{12}$ sont plus élevées.

La figure 38 montre une distribution des densités dans la chambre selon la même coupe axiale au centre du volume de contrôle. La densité du gaz tient compte à la fois de la température et des concentrations locales des espèces chimiques en présence. Cette diversité des facteurs pouvant influencer la densité explique la variation importante de cette propriété du gaz dans la chambre.

5.3 Les réfractaires

La figure 39 montre une distribution des températures (*en Celsius*) selon une

coupe transversale en aval de la tuyère no. 4 au niveau du thermocouple no. 3 (à 32 m de l'entrée du gaz). La température moyenne externe calculée est de 226 °C comparativement à la température mesurée de 204 °C (Perron et Desgroseilliers p 247). Les autres thermocouples externes étaient hors d'usage en raison de la pluie abondante durant cette journée de la campagne de mesures.

5.4 Bilans

Les bilans massiques pour la chambre et lit de coke sont détaillés aux tableaux 2 et 4. Les bilans énergétiques pour la chambre ,le lit de coke et les réfractaires le sont aux tableaux 3,5, et 6. Chacun des bilans a été calculé à partir des résultats de la simulation faite pour les données expérimentales du 11 octobre 1990. Pour les bilans massiques le signe + signifie un apport de matière et le signe – signifie le rejet de matière hors du volume de contrôle. De façon analogue pour les bilans énergétiques le signe + signifie un gain d'énergie et le signe – une perte d'énergie.

Pour le modèle de la chambre, la source d'énergie principale est la combustion des matières volatiles provenant de la surface du lit. Dans la version actuelle du modèle on doit spécifier la section à la surface du lit où se dégageront les matières volatiles.

Pour le modèle du lit de coke, le transfert net d'énergie à la surface du lit contient un terme de gain et un terme de perte. Le gain d'energie est dans la zone de préchauffage qui est située entre les tuyères et la sortie des gaz. Tandis que la perte d'énergie est dans la zone de refroidissement qui est située entre la décharge du four et les tuyères.

Dans le bilan massique du lit, on ne considère pas les pertes de masse occasionnées par la dévolatilisation, par le poussierage et par l'évaporation de la vapeur d'eau.

En comparant le bilan massique actuel et celui obtenu avec l'ancien modèle de combustion, on trouve que les bilans sont comparables. Par exemple, le transfert net d'énergie au lit et aux réfractaires par rapport à l'énergie produite par combustion, est de 36% pour l'ancien comparativement à 40% pour le nouveau modèle. Notons que l'écart s'explique par les conditions d'opérations qui diffèrent légèrement entre les deux modèles.

5.5 La comparaison des résultats avec les résultats antérieurs

En février 1992, le modèle 3D fut validé pour la première fois sur les données du four d'Arvida de la journée du 10 octobre 1990 et les résultats furent présentés [20] dans le rapport no.23. Par contre, les résultats que nous venons de discuter ont été obtenus avec le nouveau modèle amélioré au niveau du modèle de combustion, du modèle des réfractaires et des poussières.

La table suivante présente certaines comparaisons faites à partir de résultats obtenus avec les deux modèles. Pour le modèle antérieur, les figures 40 à 45 (voir annexe B) sont tirées du rapport no.23 [20].

COMMENTAIRES
<ul style="list-style-type: none"> - les figures 18 et 40. - le modèle amélioré a une température maximale inférieure de 600°C pour cette coupe axiale du four. - la distribution des températures est plus homogène dans le modèle amélioré.

COMMENTAIRES
<ul style="list-style-type: none"> - les figures 19 et 41. - la distribution des températures est plus stratifiée pour le modèle amélioré . - on observe une répartition plus asymétrique des températures pour le modèle amélioré, dû à l'effet de rotation. - la température maximale est plus basse pour le modèle amélioré.
<ul style="list-style-type: none"> - les figures 33 et 42. - la fraction massique de O_2 est trop élevée près de la surface du lit pour le modèle antérieur.
<ul style="list-style-type: none"> - les figures 15 et 43. - les températures finales du coke sont similaires pour les deux modèles, cependant les taux de chauffage diffèrent dans la zone de chauffage entre 0 et 30m. Il faut noter ici que le nouveau modèle fournit directement le profil de température sans devoir ajuster aucun paramètre au niveau des chaleurs de combustion.
<ul style="list-style-type: none"> - les figures 34 et 44. - la fraction massique de CO_2 est plus basse pour le modèle antérieur, à la sortie de la chambre, et la nouvelle concentration de CO_2 correspond très bien aux valeurs mesurées.
<ul style="list-style-type: none"> - les figures 35 et 45 - la fraction massique de H_2O est trop basse à l'entrée du coke pour le modèle antérieur, le coke de pétrole vert contient beaucoup d'humidité. Étant donné que le nouveau modèle génère de fortes concentrations d'eau à l'entrée, l'échelle de couleurs a été ajustée en conséquence avec comme résultats toutefois que les concentrations de l'eau de combustion deviennent trop faibles pour être distinguées.

De plus, une comparaison des résultats obtenus alors et aujourd'hui révèle des améliorations importantes. Dû à un meilleur modèle de combustion, les distributions de températures sont obtenues avec plus de détails dans la direction

transversale et longitudinale. La présence des zones de recirculation des gaz à certains endroits le long du four est révélée. Ces recirculations contribuent à expliquer la forme en cloche des profils de températures des gaz, forme qui constitue une différence notable par rapport aux profils obtenus antérieurement (figure 7, réf. [20]). Le modèle de combustion amélioré permet de calculer séparément les fractions massiques de chaque espèce, les réactifs aussi bien que les produits, et de les comparer avec les mesures, ce qui bonifie considérablement la validation du modèle global. Avec le modèle de combustion amélioré on spécifie les zones de dégagement et de combustion de chacune des matières volatiles. Certains rapprochements des résultats simulés avec les observations physiques sont possibles; c'est le cas de la boule de feu près de la tuyère no. 4 dont l'emplacement coïncide avec celui du taux maximal de disparition de l'hydrogène. L'inclusion des poussières a permis d'obtenir des résultats plus réalistes, notamment ceux du transfert radiatif, et les bilans massiques et énergétiques ont été améliorés. Enfin l'ajout du modèle des réfractaires avec l'effet de la rotation a permis d'améliorer le calcul de transfert de chaleur dans le lit ce qui donne des températures et gradients de températures réalistes à l'intérieur du lit.

Dans le précédent modèle de combustion, toutes les espèces chimiques étaient imputées à une seule variable, soit la fraction de mélange. Dans la version actuelle, chaque espèce chimique est associée à une variable, de sorte qu'il est possible d'introduire une cinétique de réaction et un taux de dégagement à la surface du

lit pour chaque matière volatile. Par ailleurs, il devient possible de confronter les concentrations spécifiques obtenues par simulation avec les mesures, à la sortie de la chambre. Par rapport à l'ancien modèle, le gain le plus appréciable se situe au niveau de l'expression du terme source pour l'énergie libérée par combustion. Antérieurement, il fallait introduire une chaleur de combustion représentative de l'ensemble des combustibles. Cette façon de faire générait des températures excessives à certains endroits dans la chambre. Pour utiliser adéquatement cette approche, il fallait faire plusieurs essais pour déterminer une valeur raisonnable de la chaleur de combustion, la plus représentative. Rappelons que les chaleurs de combustion varient entre 32.26 MJ/kg et 120 MJ/kg pour les combustibles (les matières volatiles et les poussières) dans la chambre. Dans la version actuelle du modèle de combustion, le terme source pour l'équation d'énergie utilise un taux de réaction de chaque combustible multiplié par sa chaleur de combustion propre (voir l'équation 43).

5.6 Les figures

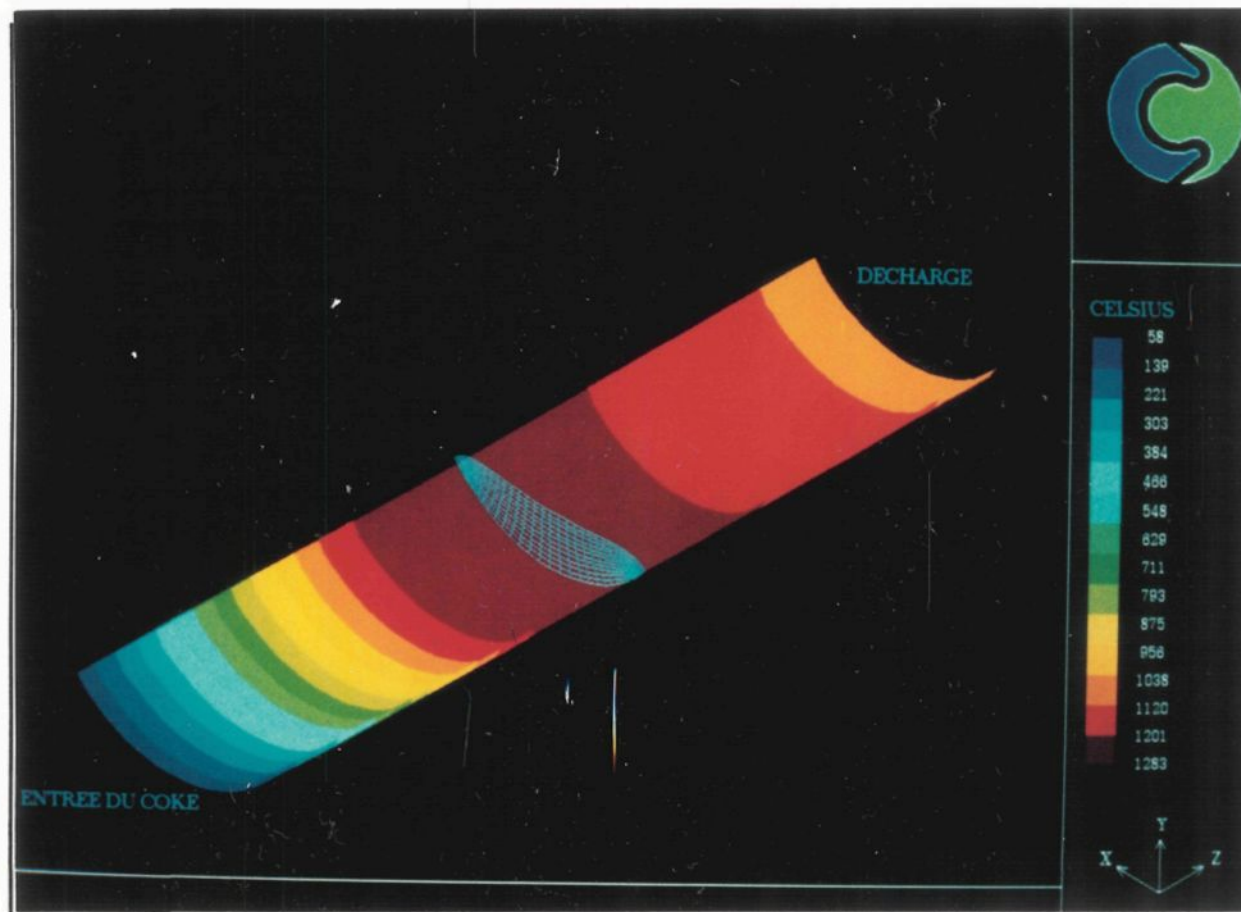


Figure 13 Champ de températures du lit de coke dans la direction axiale

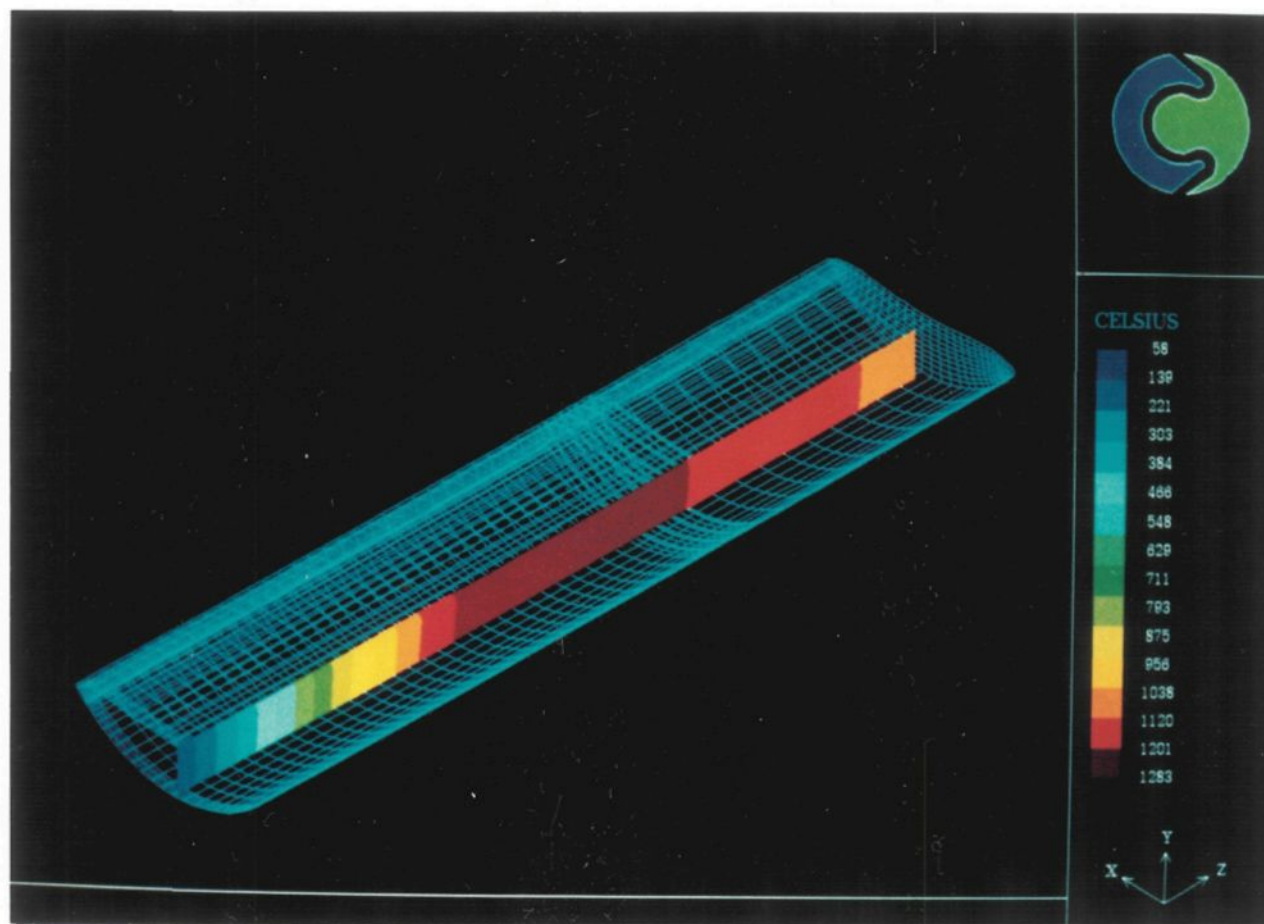


Figure 14 Effet de l'écoulement sur le transfert de chaleur dans le lit

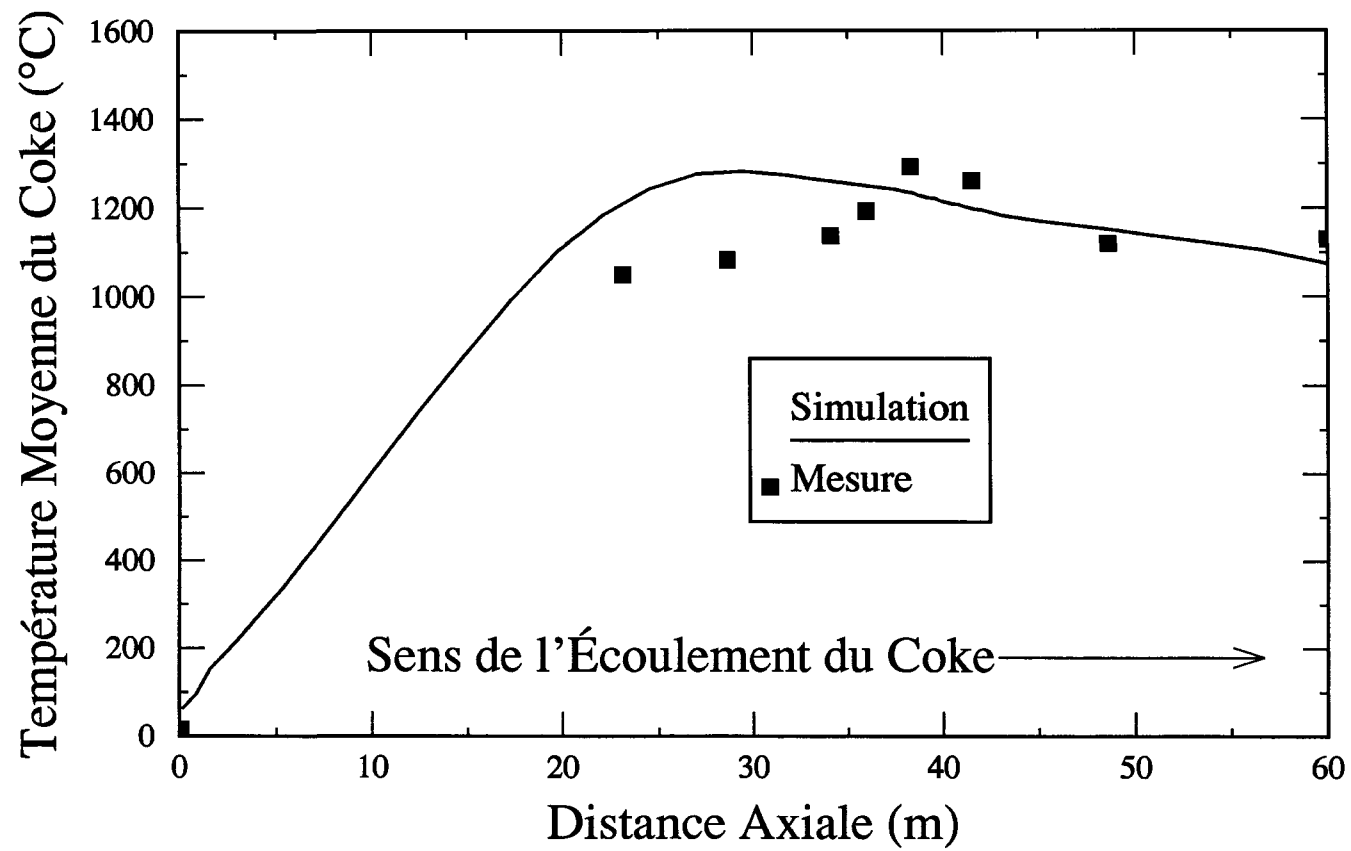


Figure 15 Variation de la température moyenne du lit de coke dans la direction axiale

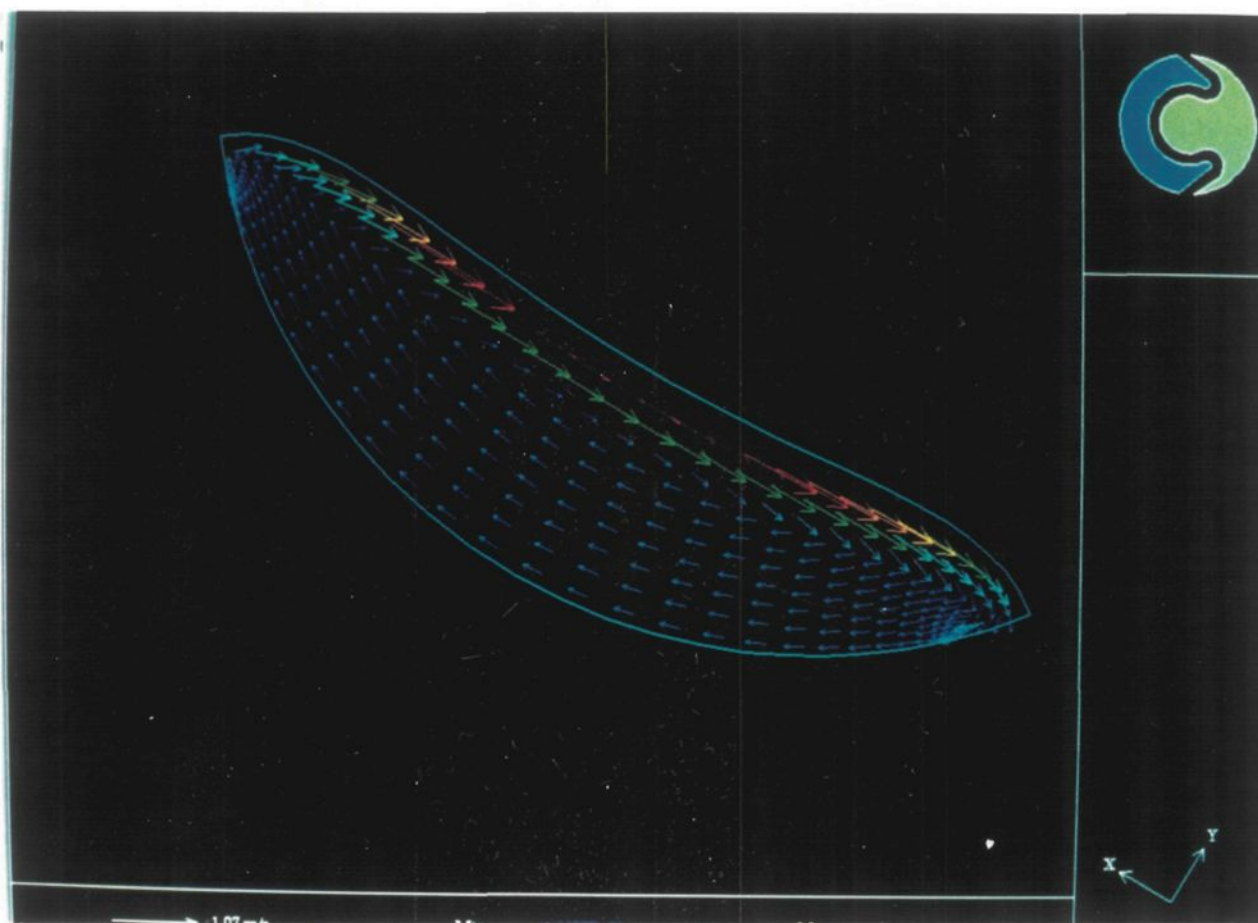


Figure 16 Champ de vitesses du coke dans la direction transversale

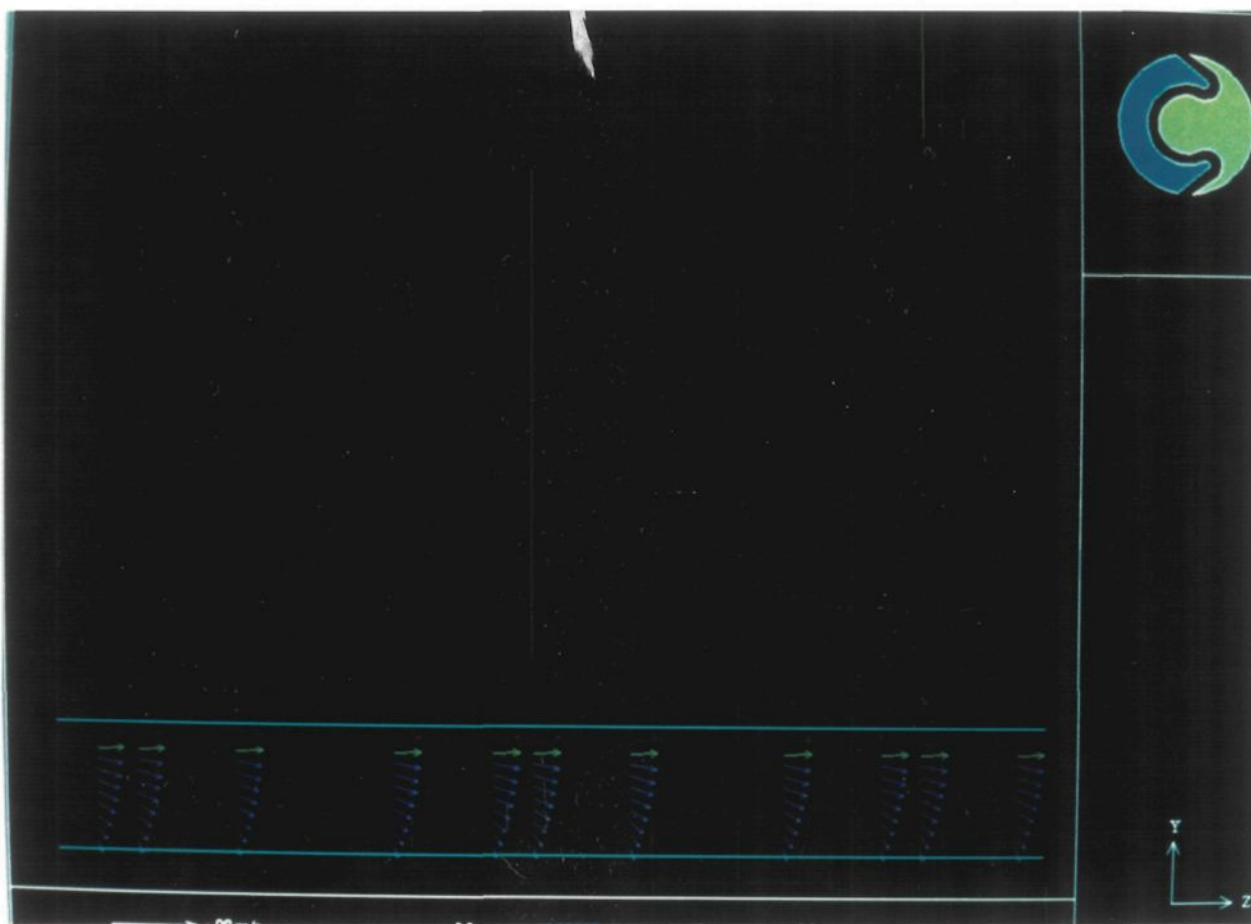


Figure 17 Champ de vitesses du coke dans la direction axiale

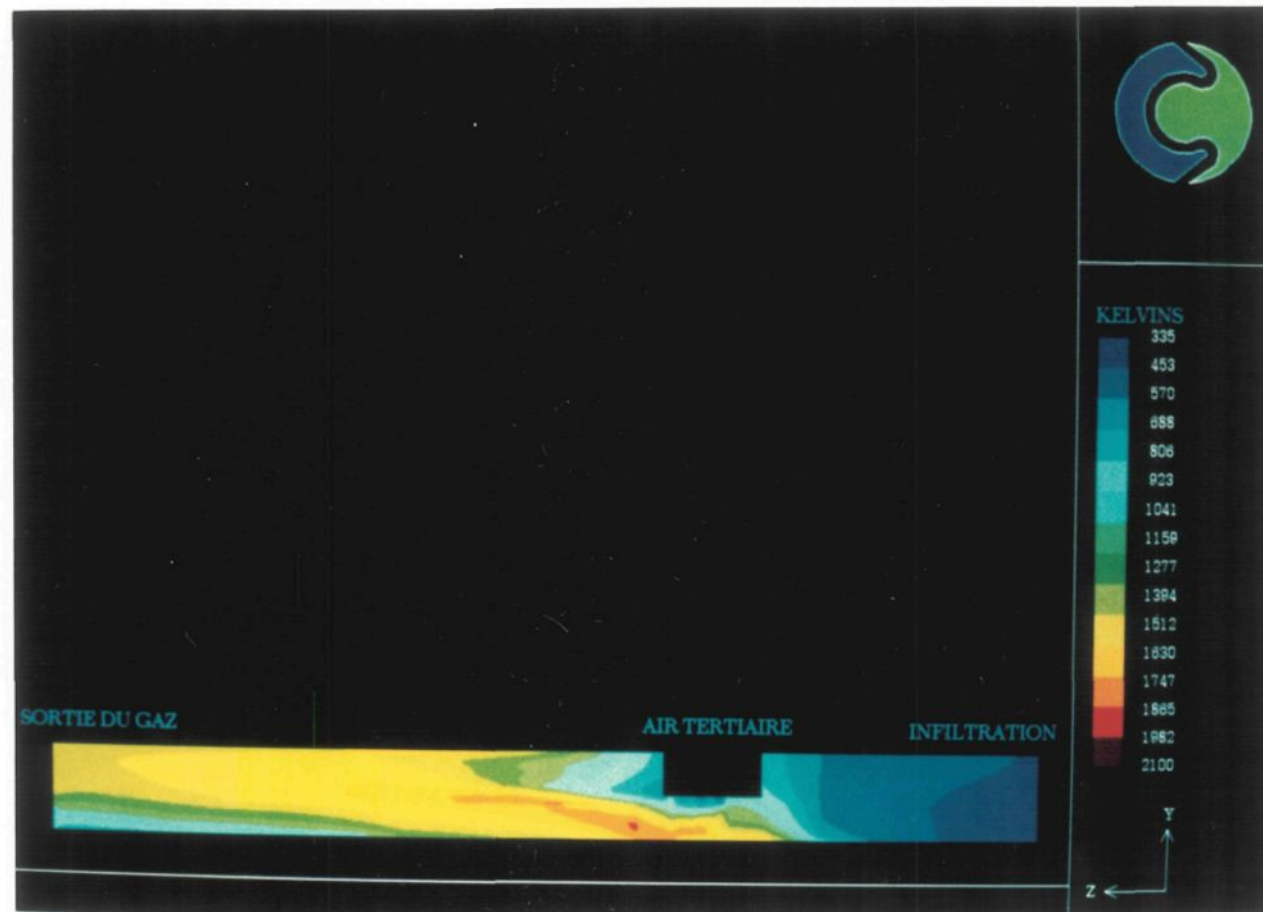


Figure 18 Champ de températures des gaz dans la direction axiale de la chambre

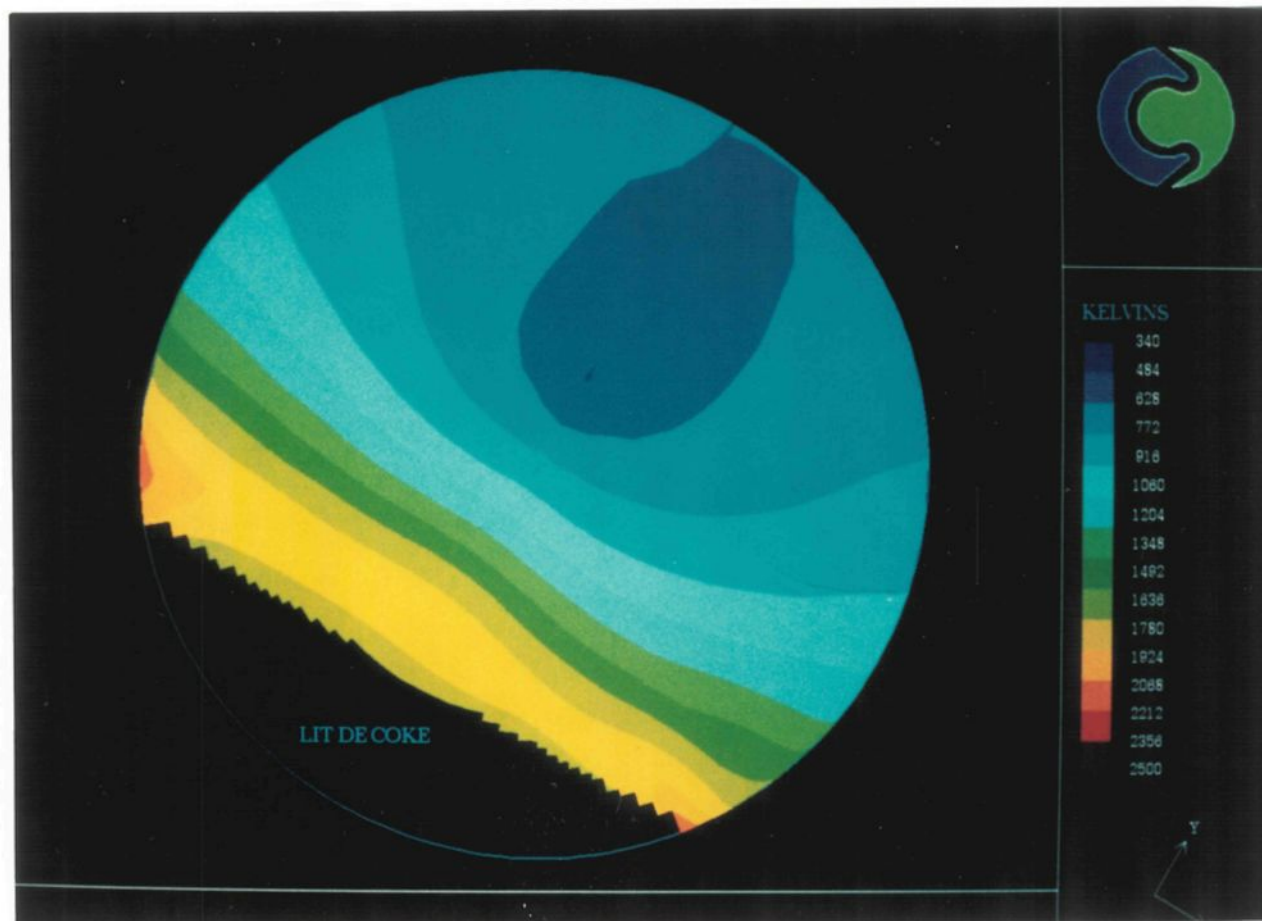


Figure 19 Champ transversal de températures des gaz, en aval de la tuyère no.4 (à 23.25m de l'entrée des gaz)

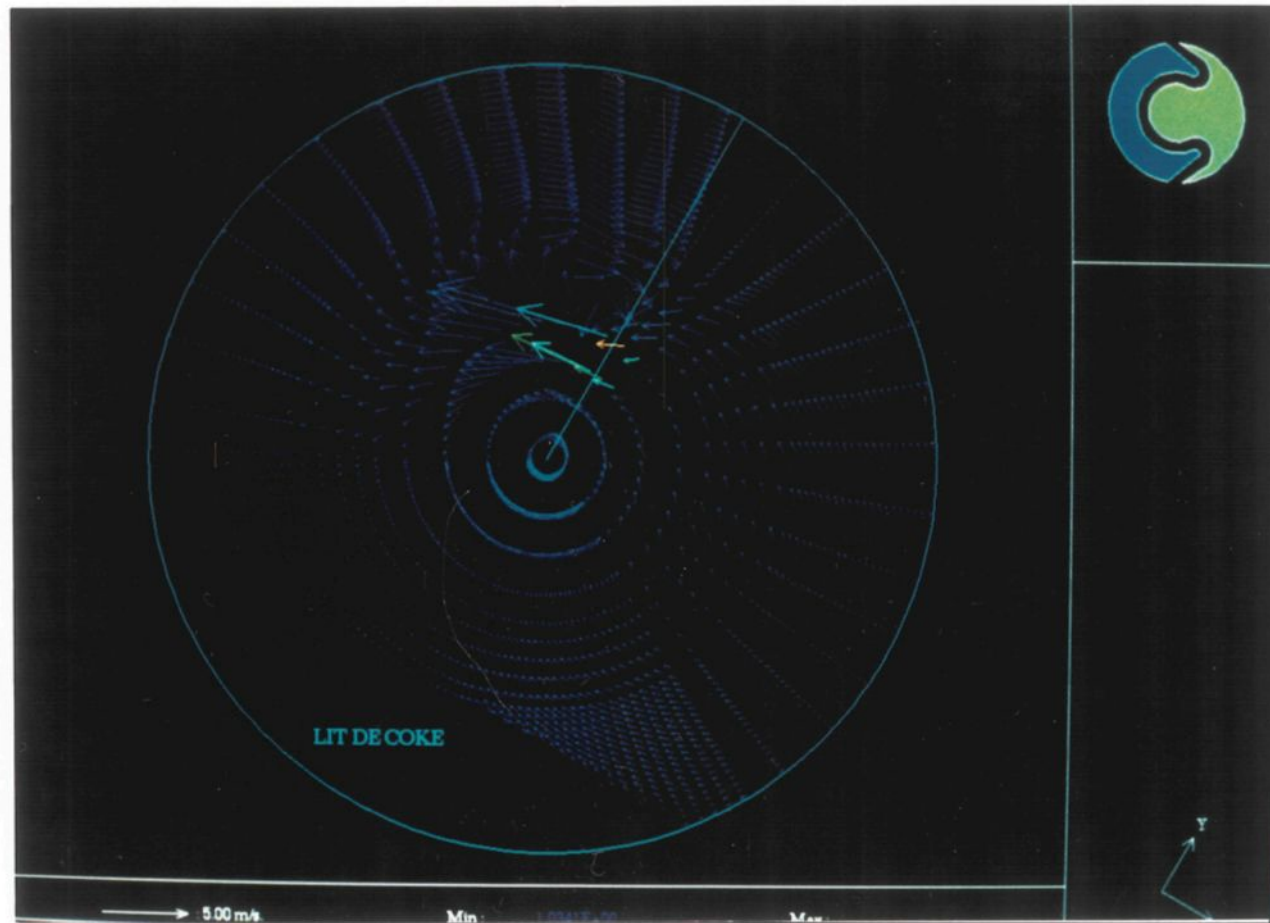


Figure 20 Champ transversal de vitesses des gaz, en aval de la tuyère no. 4 (à 23.25 m de l'entrée des gaz)

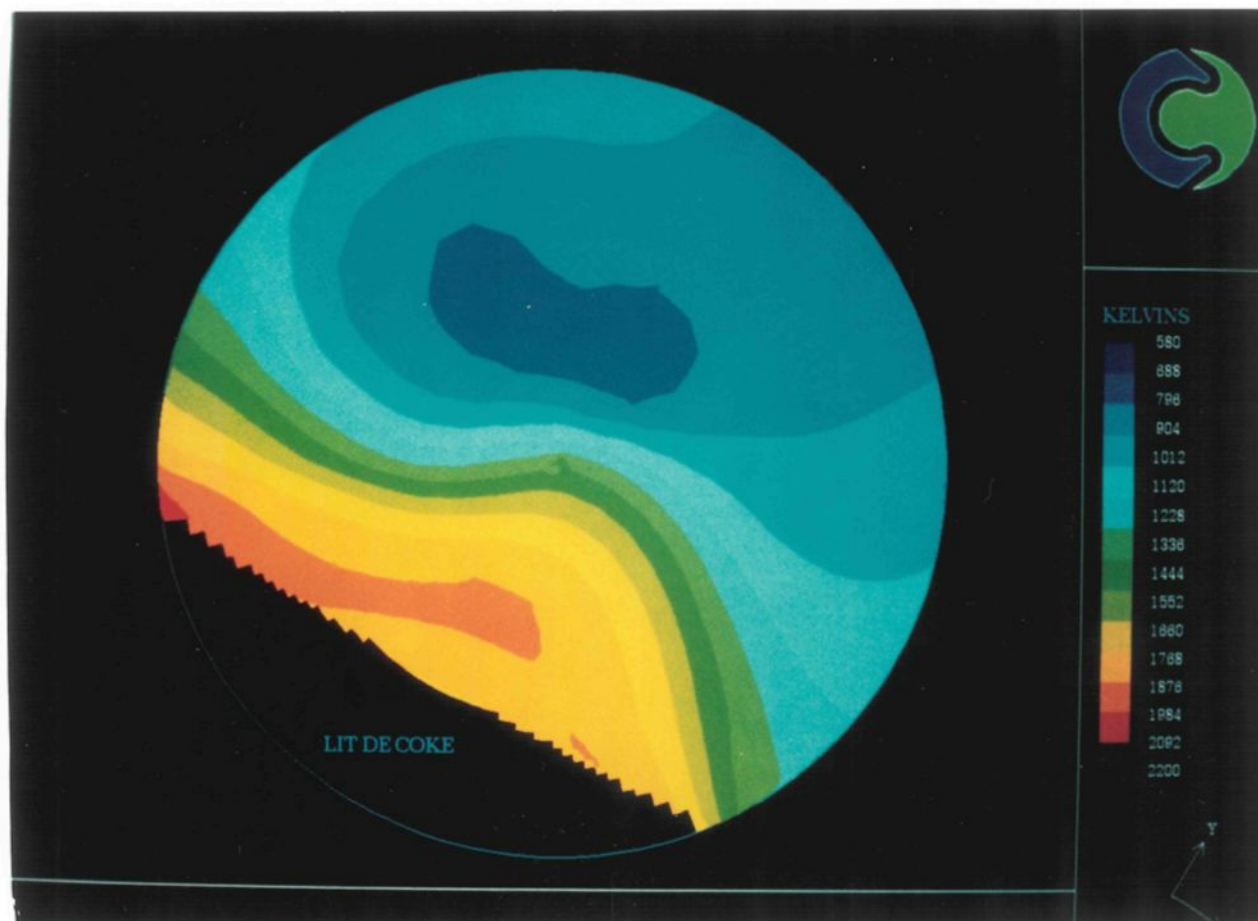


Figure 21 Champ transversal de températures des gaz à 29.06 m de l'entrée

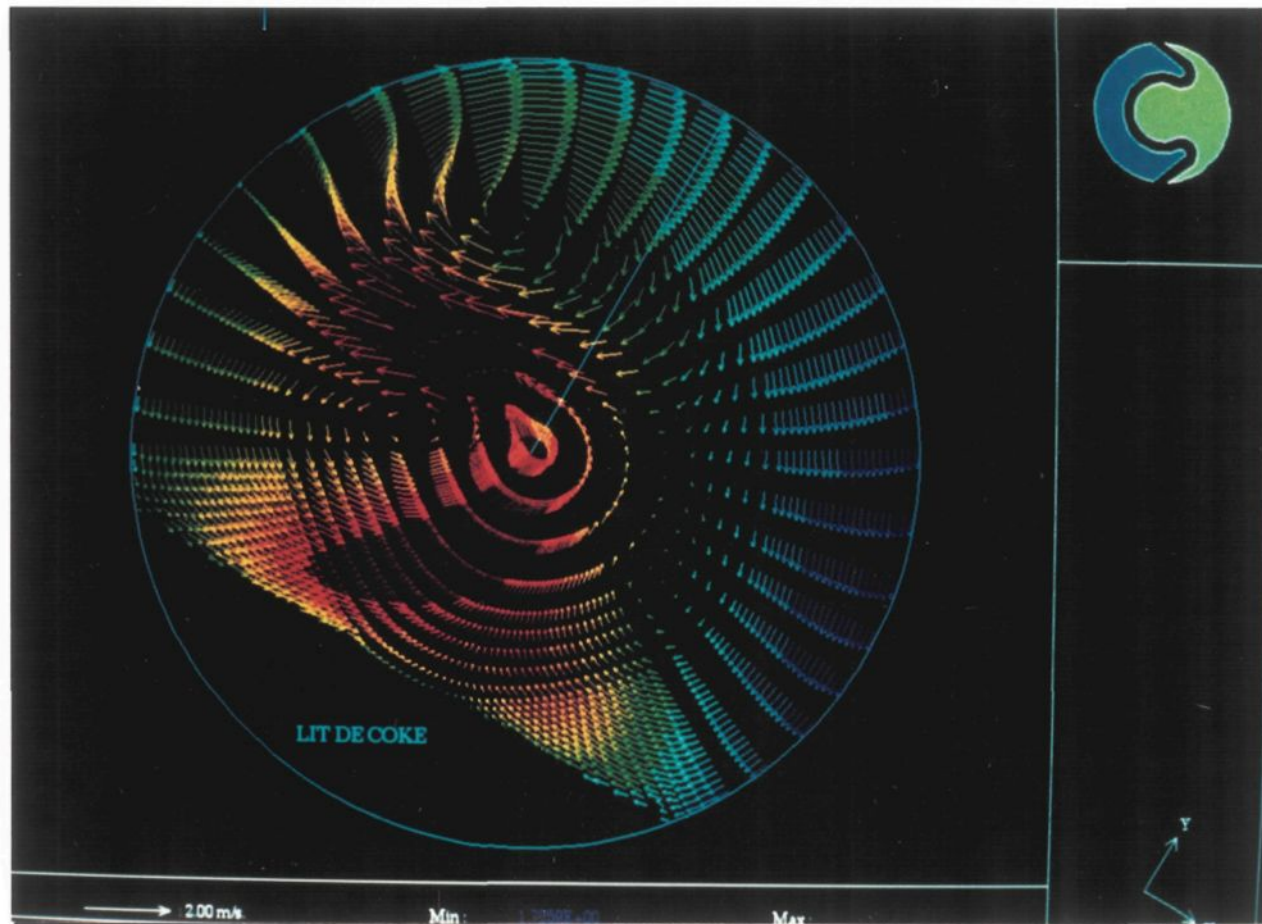


Figure 22 Champ transversal de vitesses des gaz à 29.06 m de l'entrée

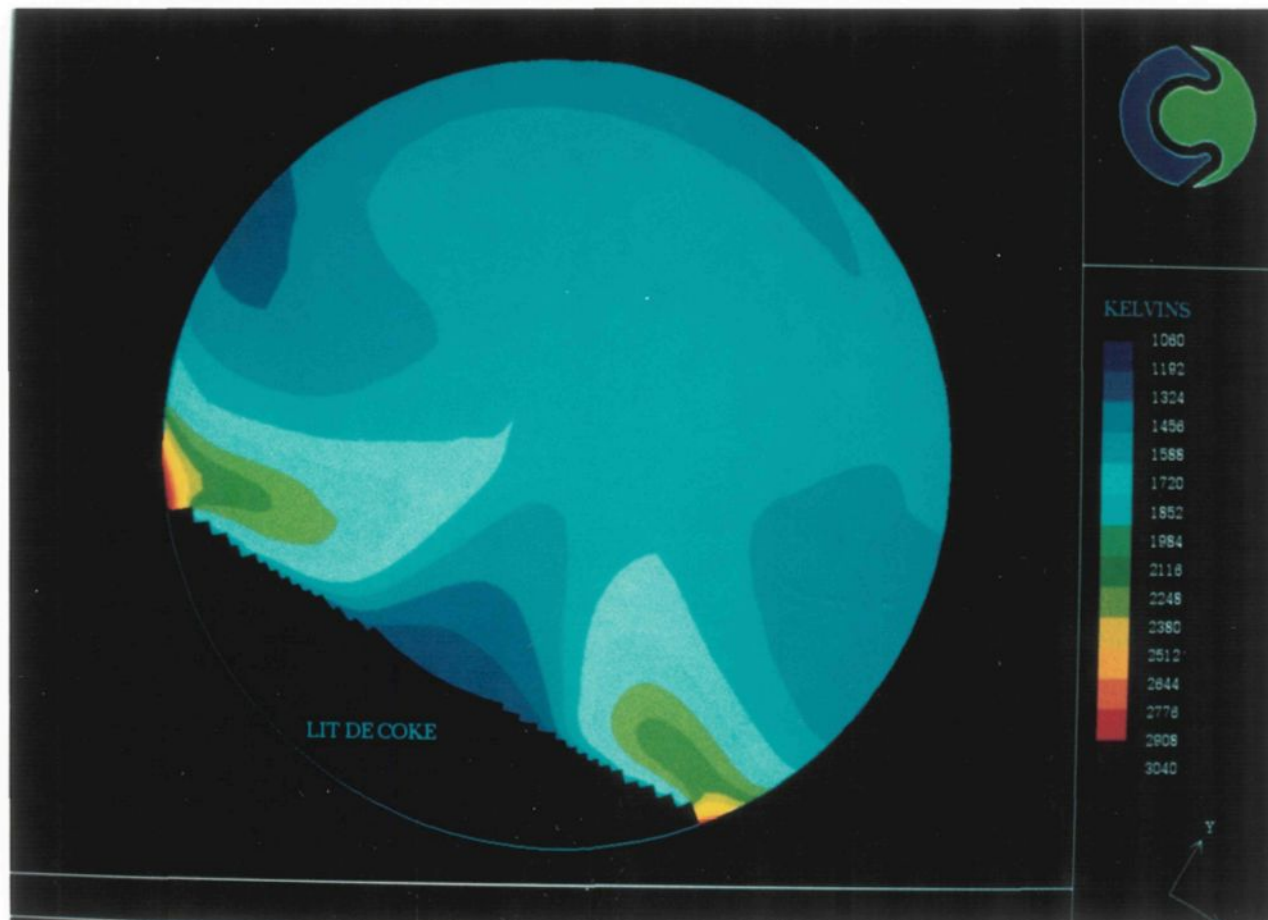


Figure 23 Champ transversal de températures des gaz à 36.32 m de l'entrée

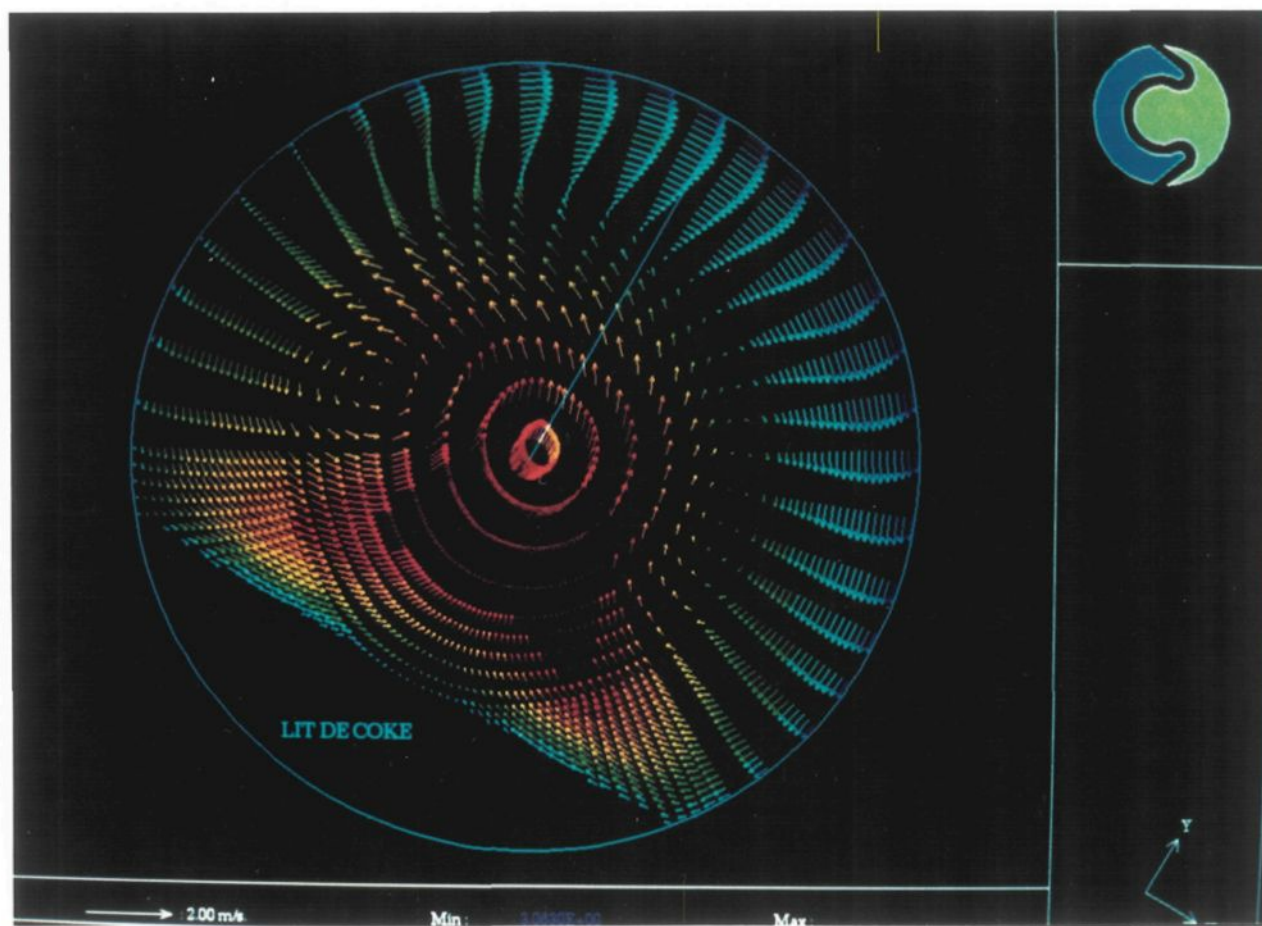


Figure 24 Champ transversal de vitesses des gaz à 36.32 m de l'entrée

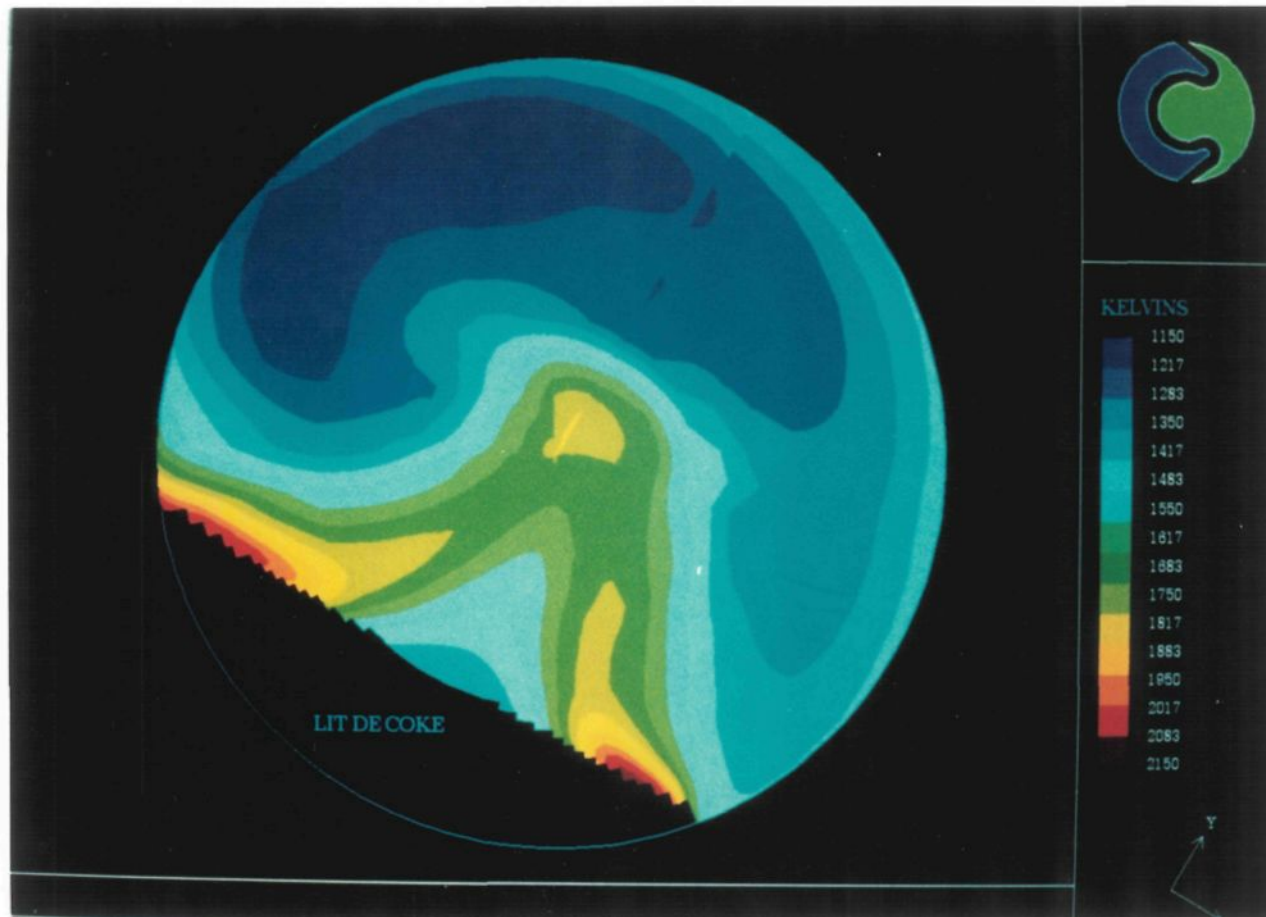


Figure 25 Champ transversal de températures des gaz à 46 m de l'entrée

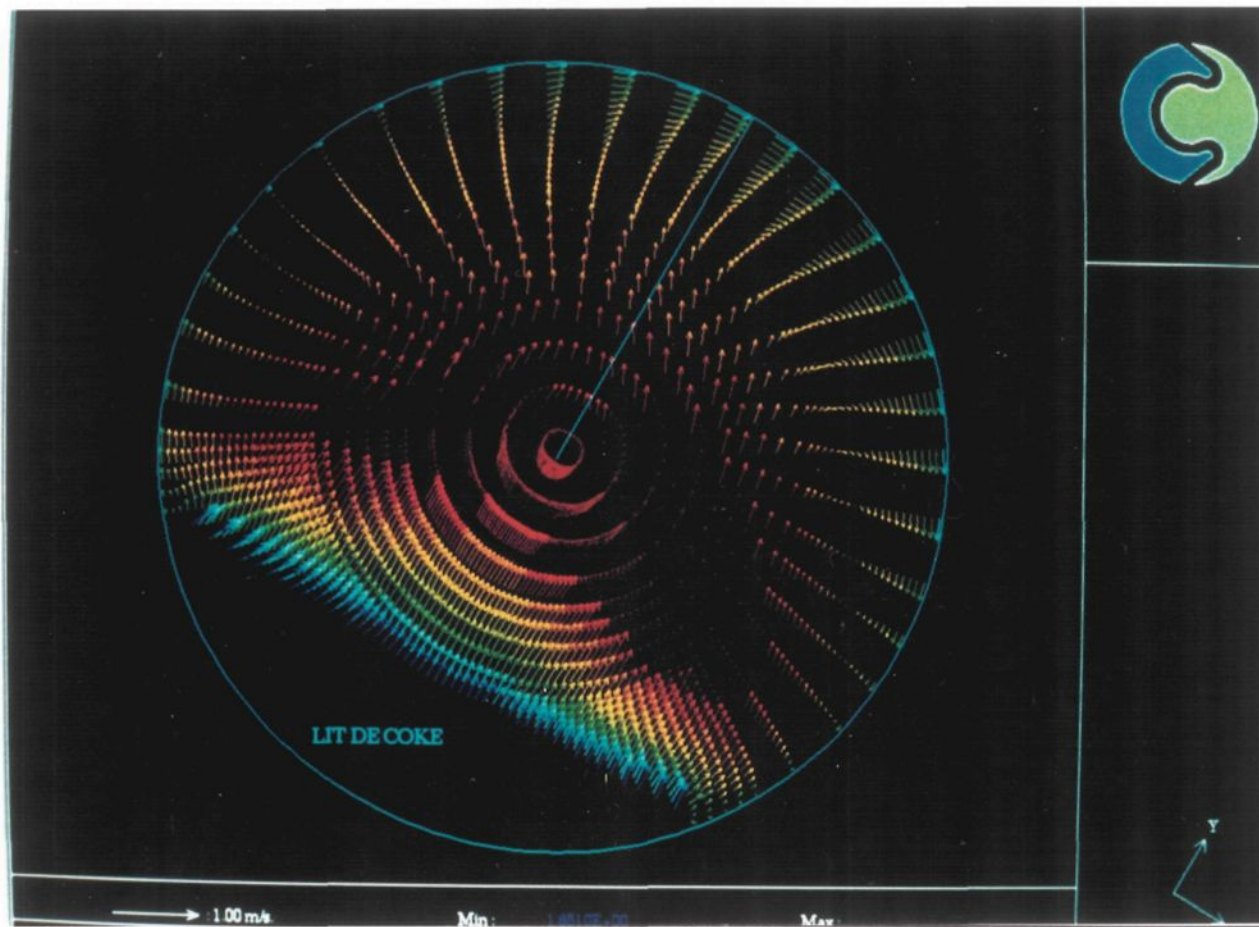


Figure 26 Champ transversal de vitesses des gaz à 46 m de l'entrée

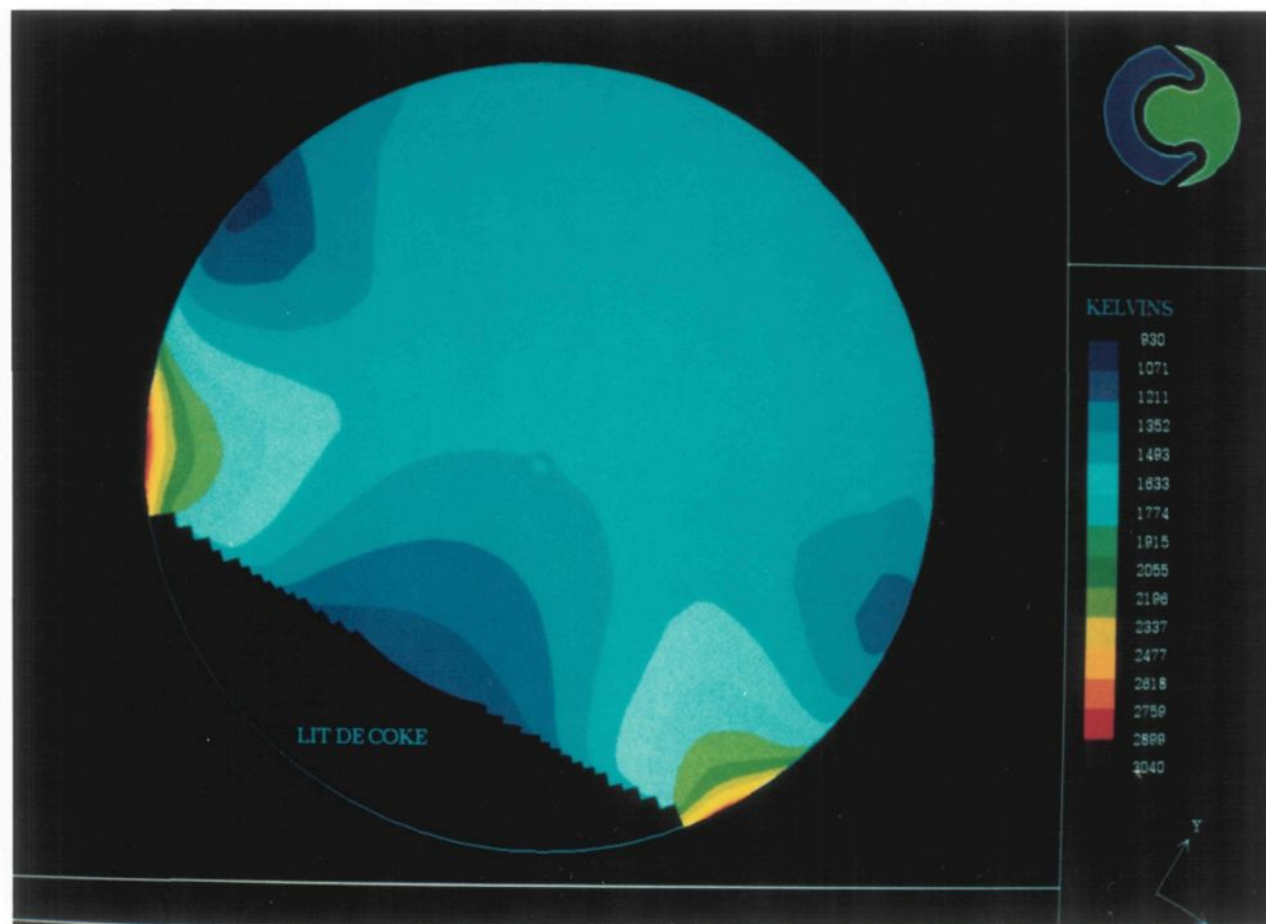


Figure 27 Champ transversal de températures des gaz à 58.11 m de l'entrée

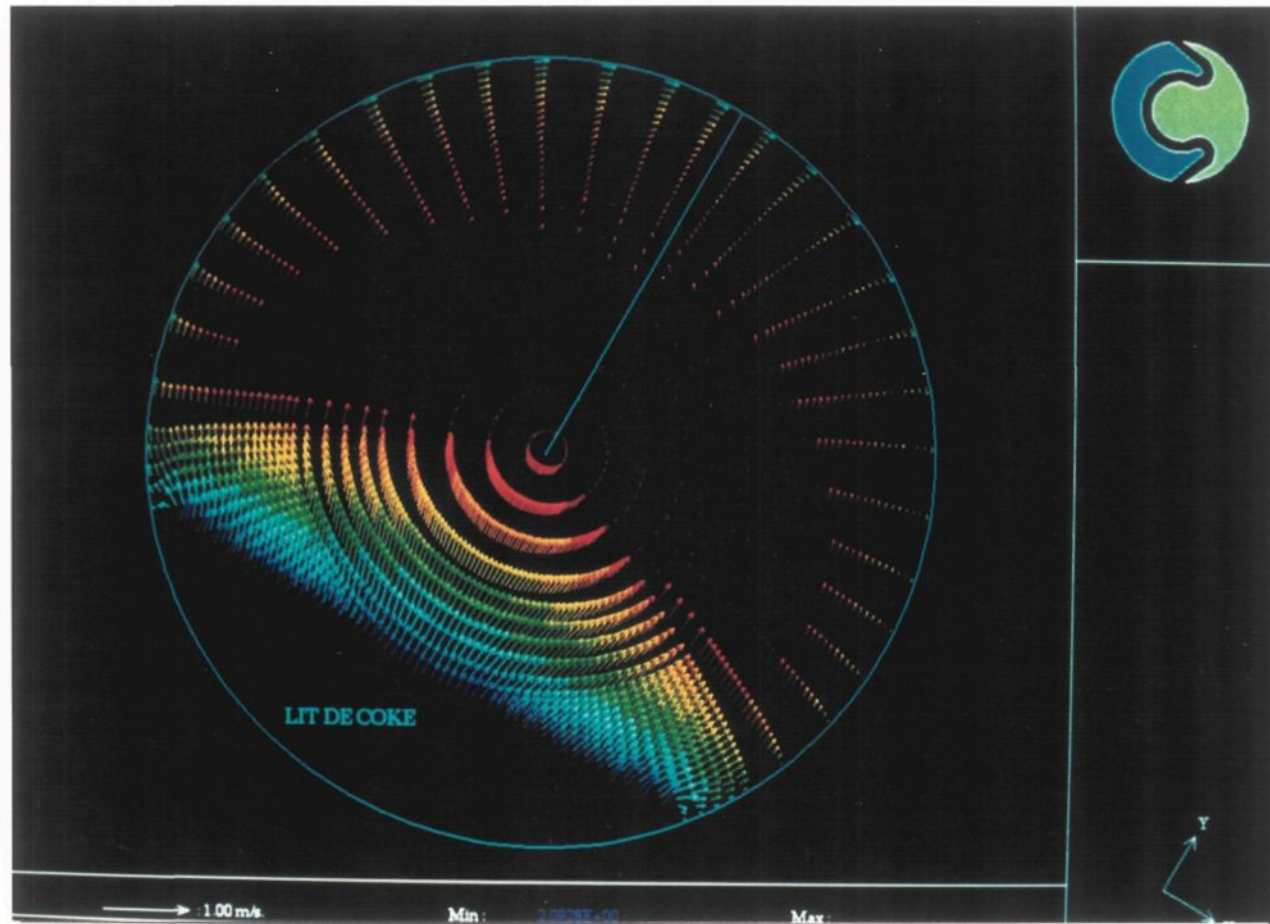


Figure 28 Champ transversal de vitesses des gaz à 58.11 m de l'entrée

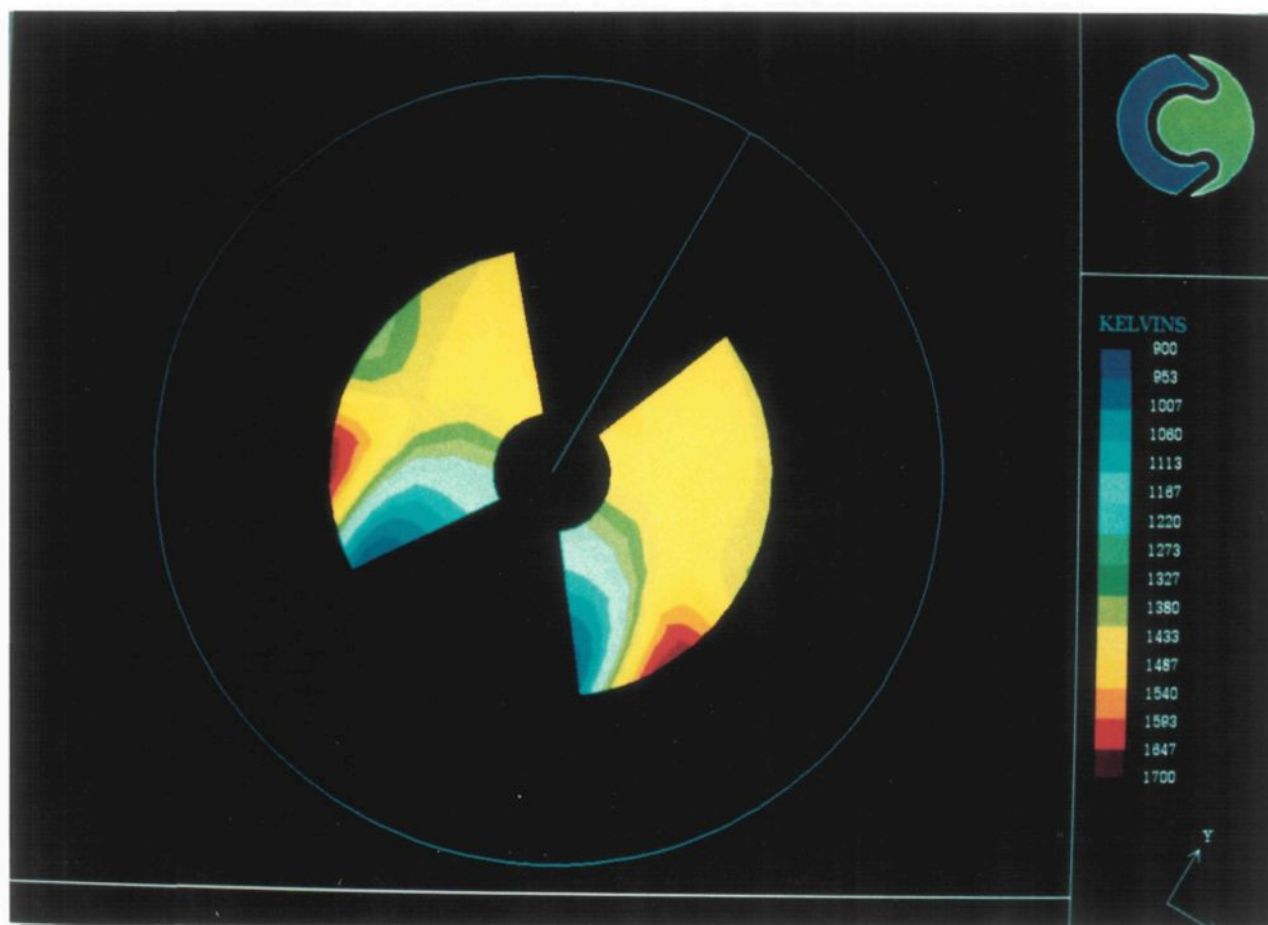


Figure 29 Champ transversal de températures des gaz aux orifices de sortie de la chambre

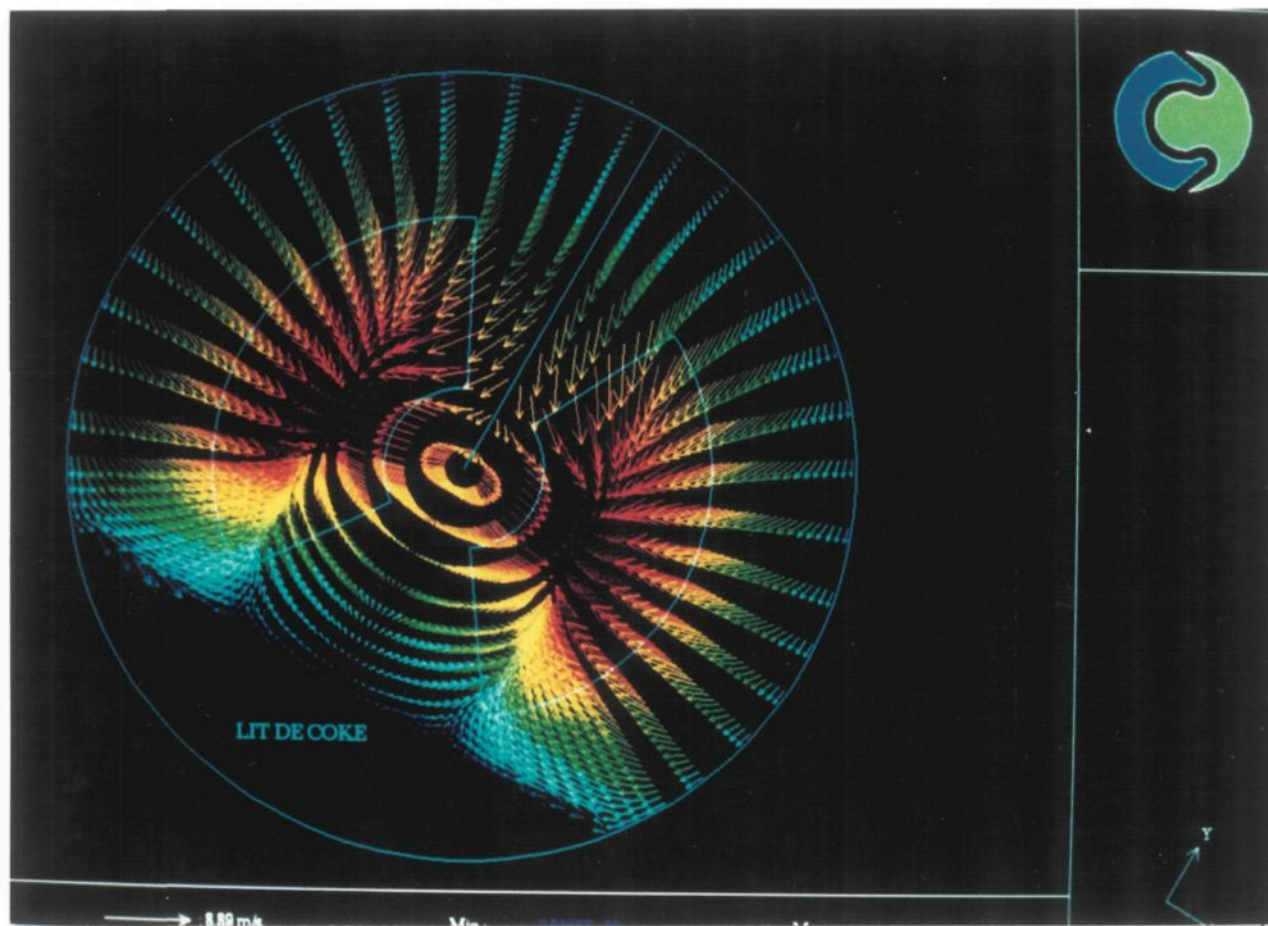


Figure 30 Champ transversal de vitesses des gaz aux orifices de sortie de la chambre

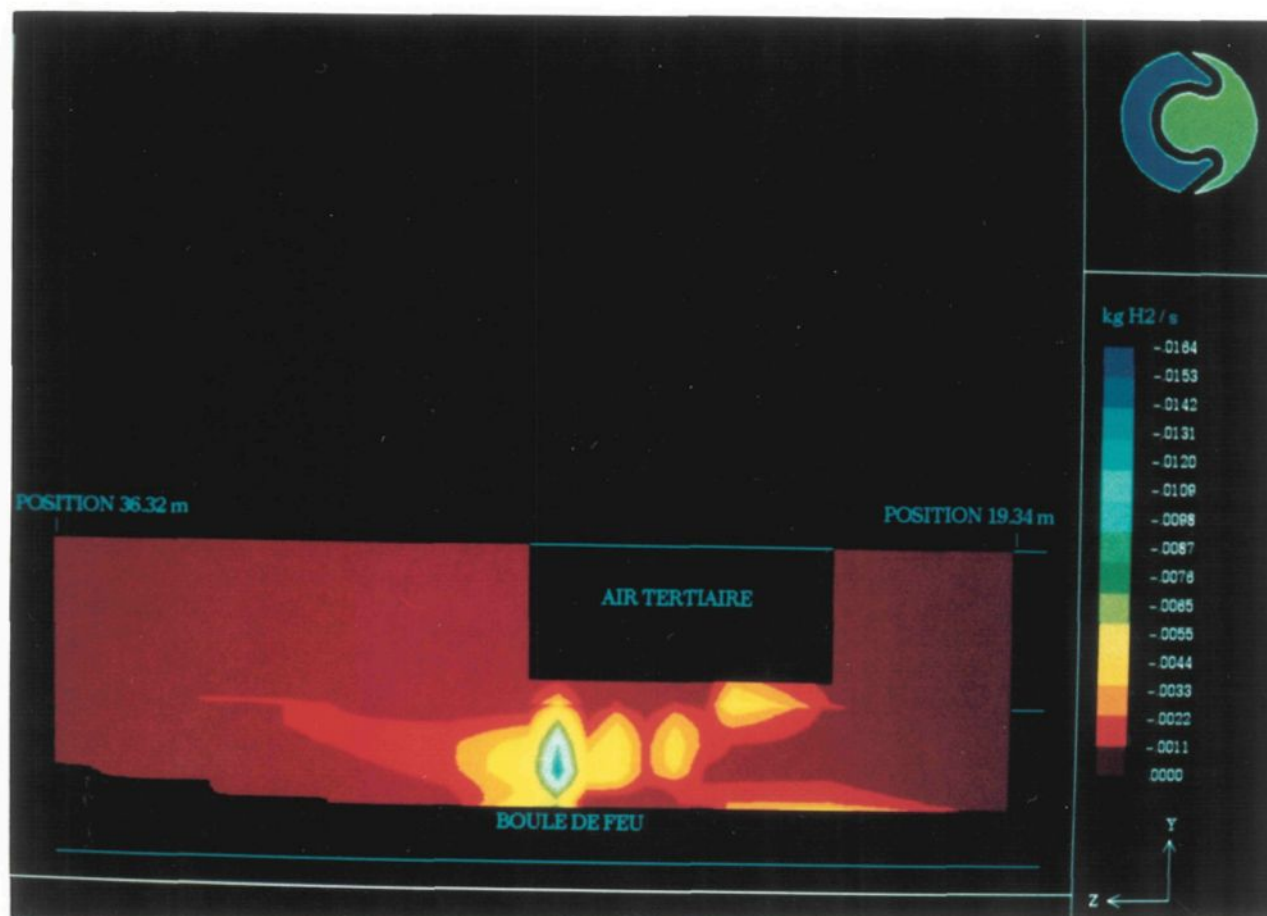


Figure 31 Contours longitudinaux du taux de disparition de H_2 près des tuyères

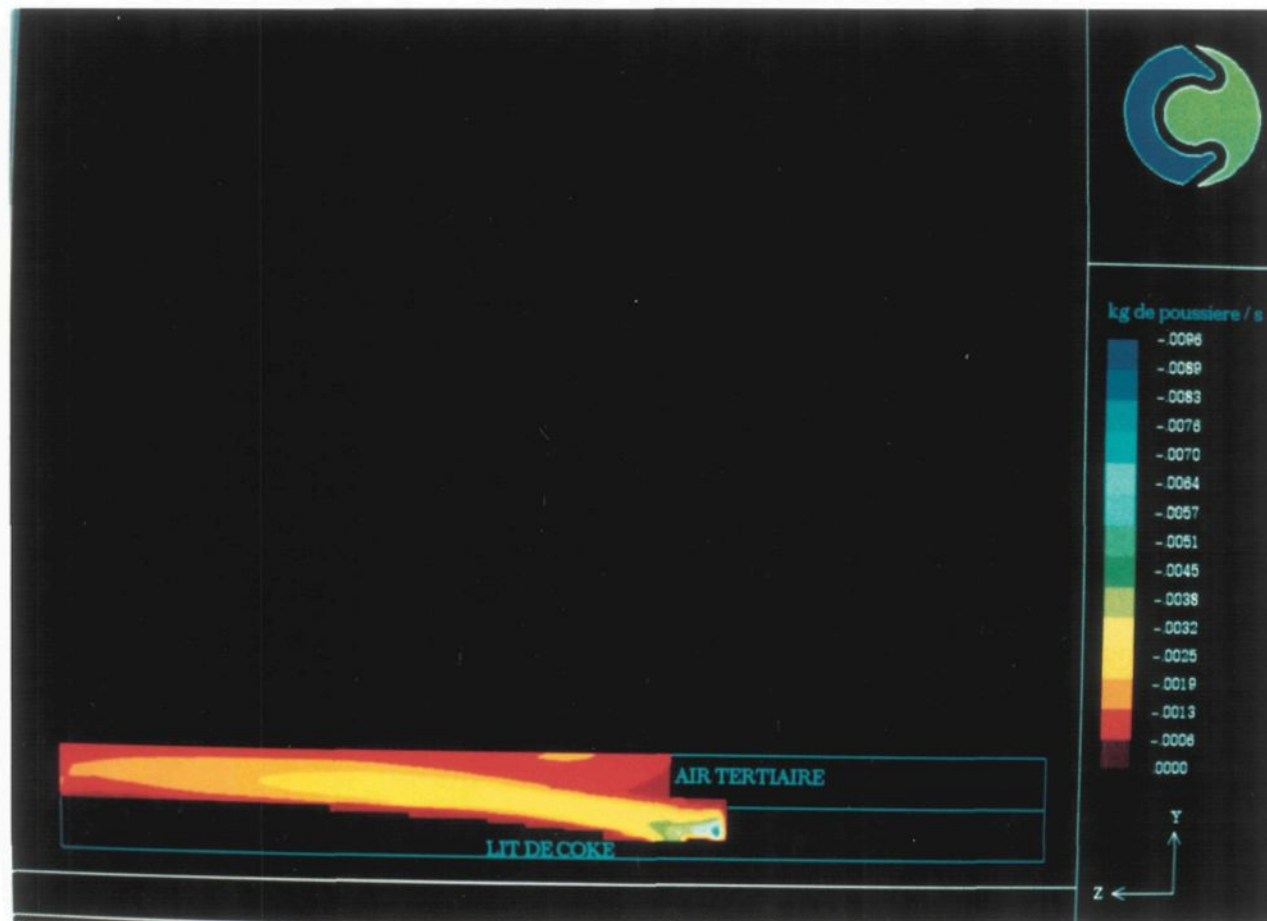


Figure 32 Contours longitudinaux du taux de disparition des poussières de coke près des tuyères

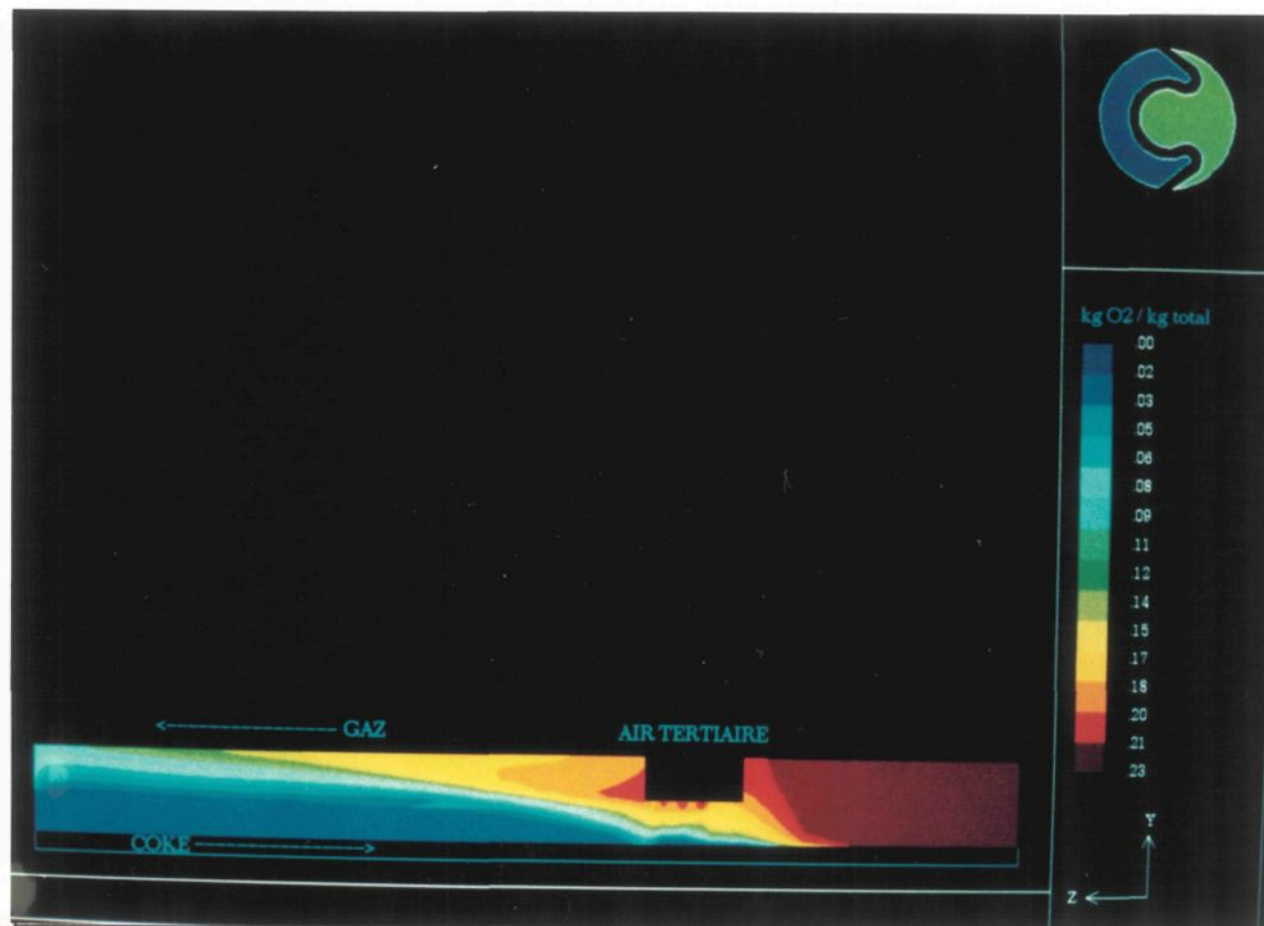


Figure 33 Contours longitudinaux de la fraction massique de l'O₂

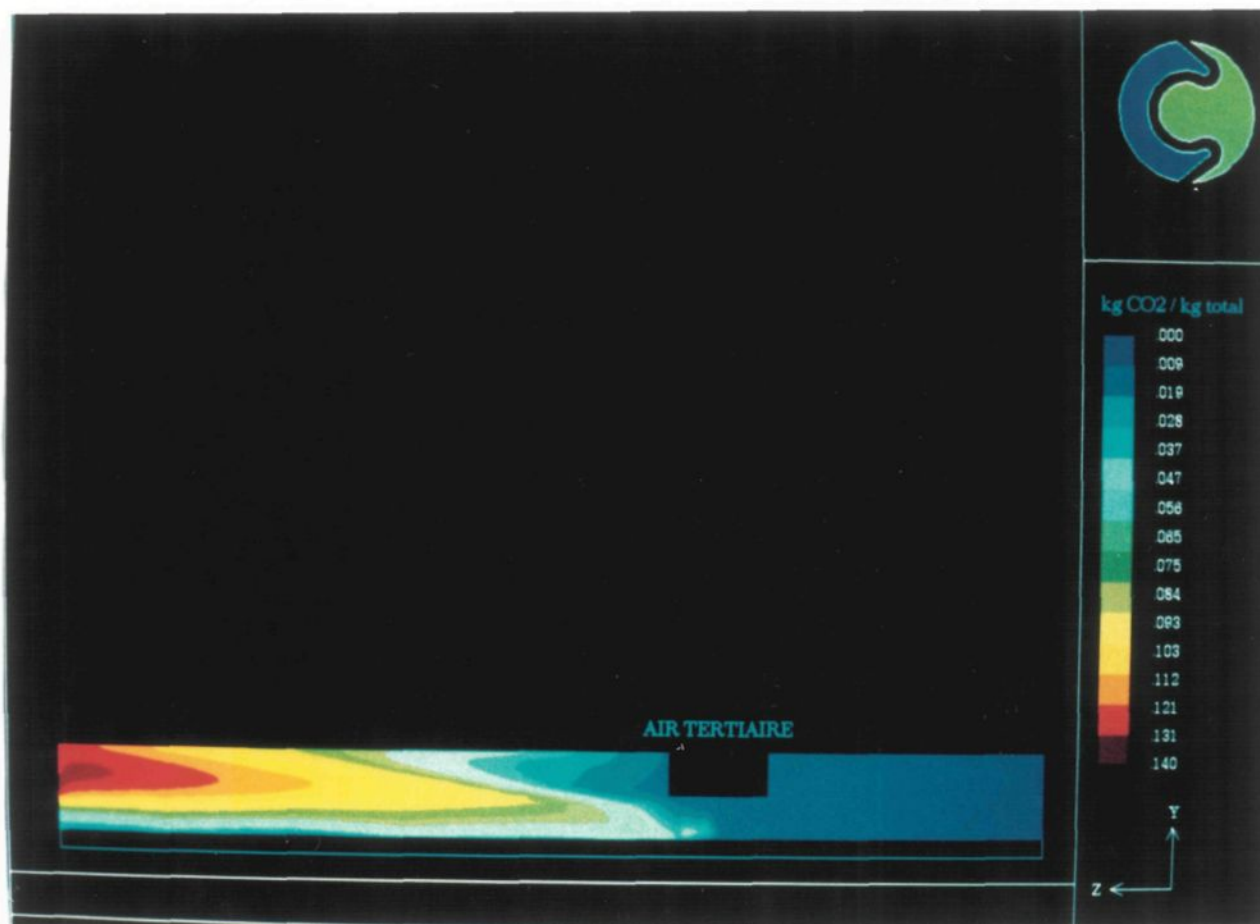


Figure 34 Contours longitudinaux de la fraction massique du CO₂

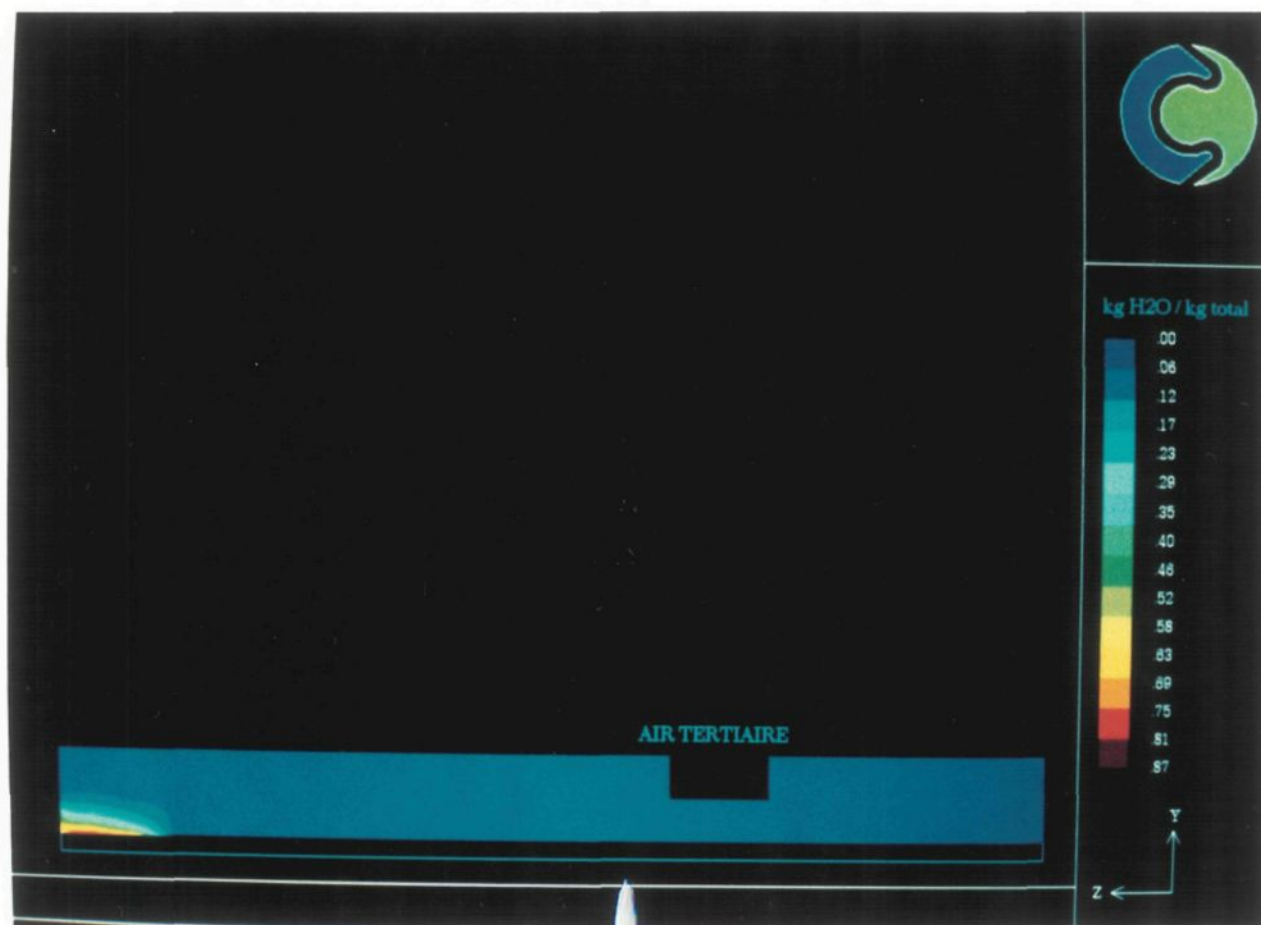


Figure 35 Contours longitudinaux de la fraction massique de la vapeur d' H₂O



Figure 36 Contours longitudinaux de la fraction massique du CH_4

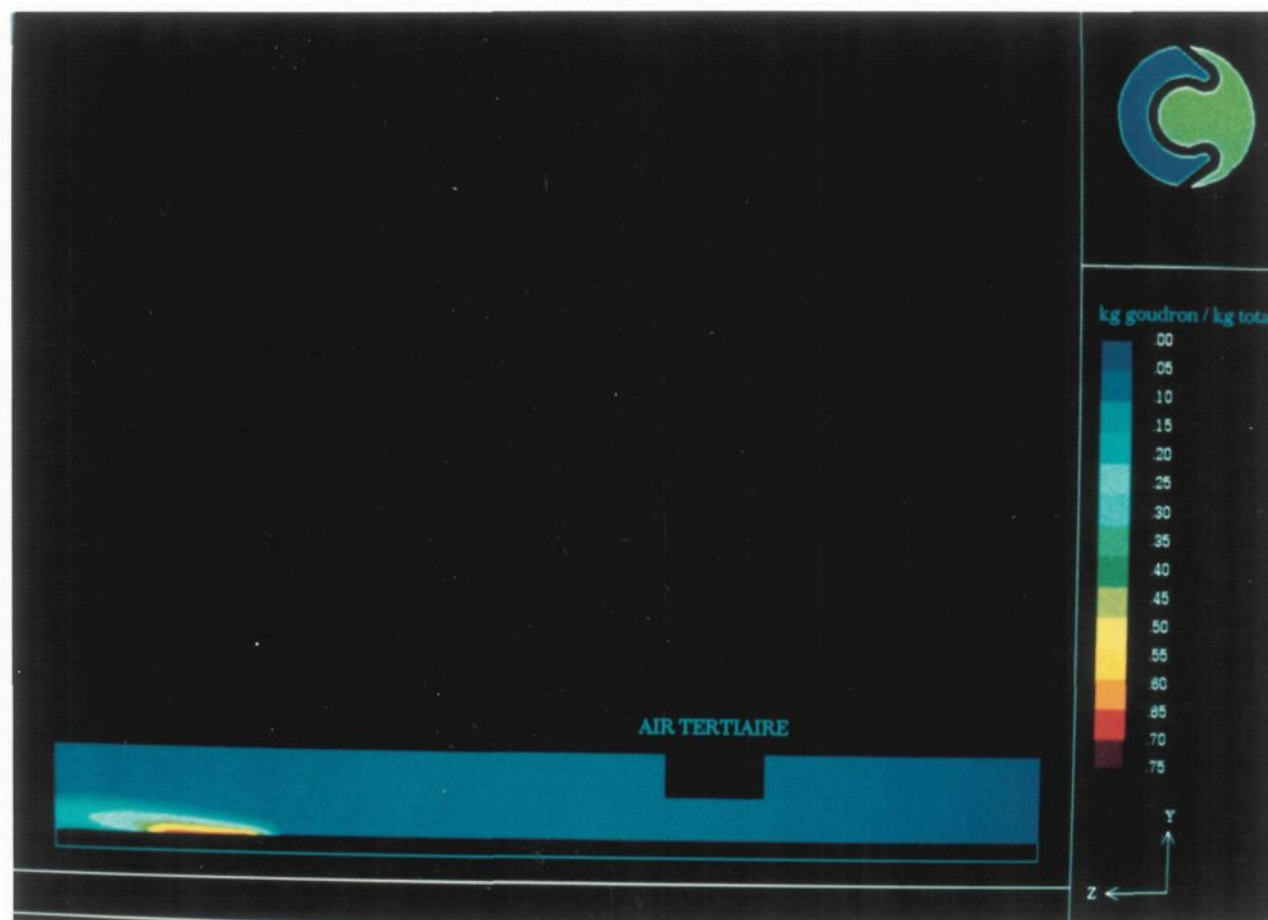


Figure 37 Contours longitudinaux de la fraction massique du goudron

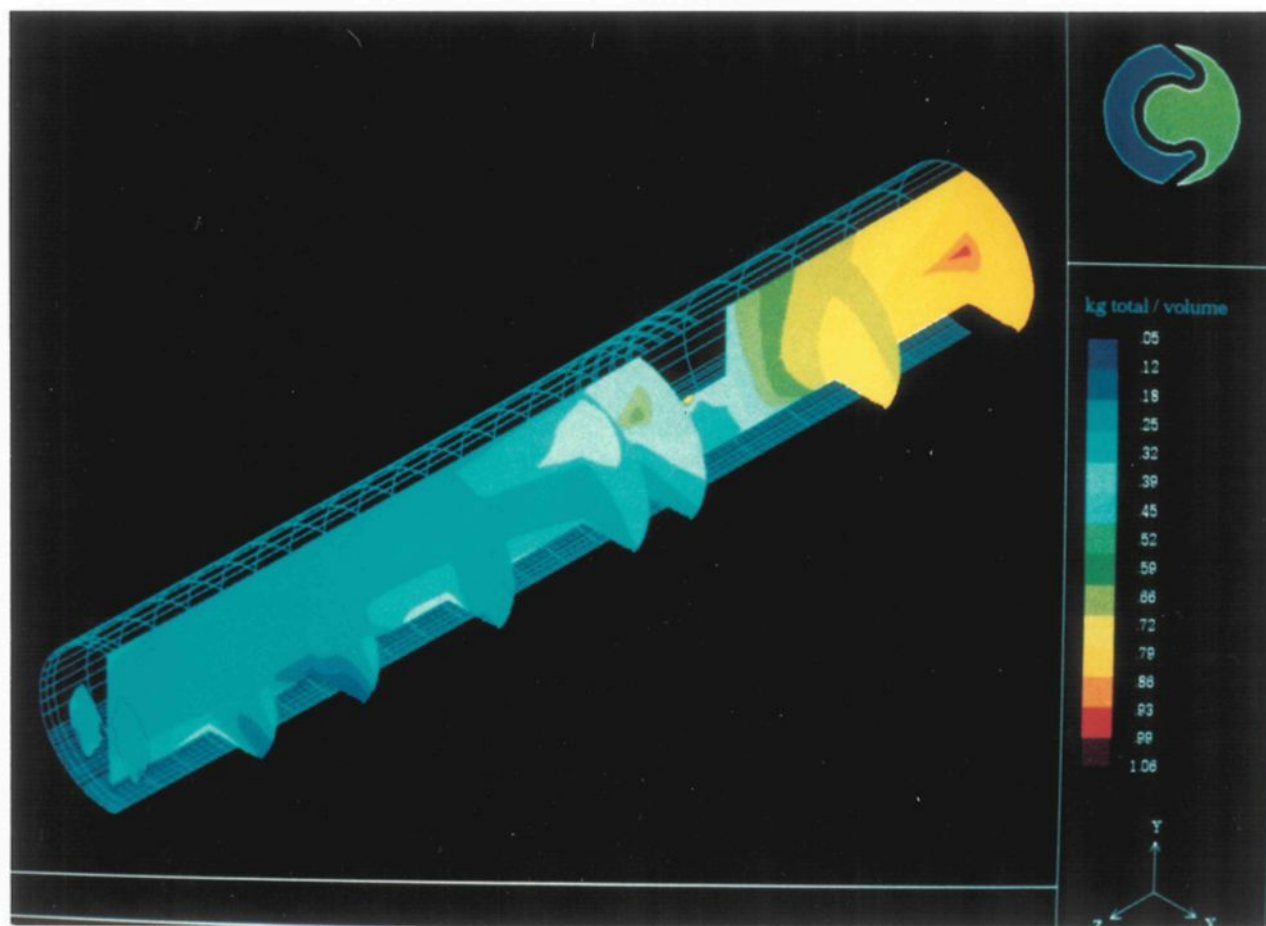


Figure 38 Champ de densités

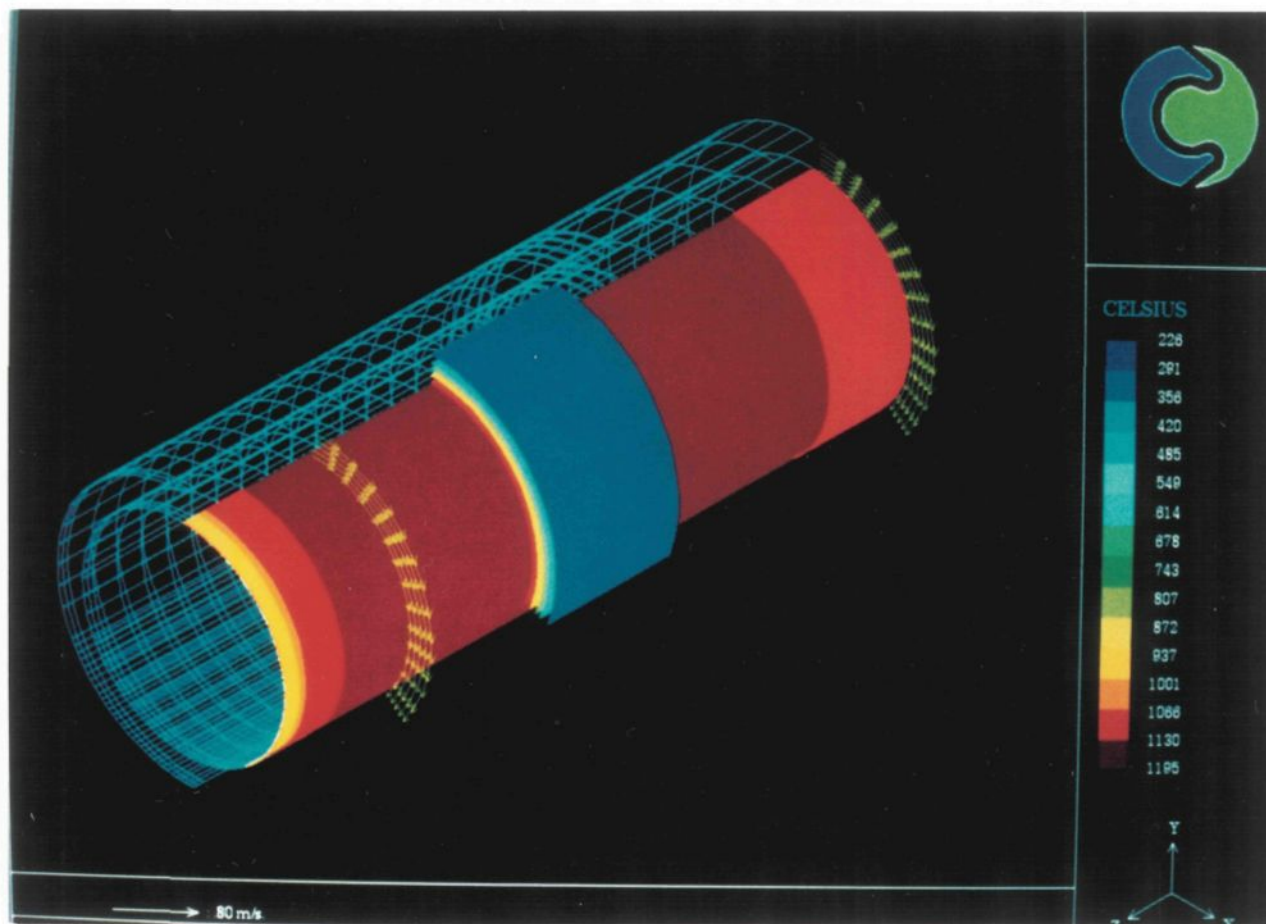


Figure 39 Champ de températures dans les réfractaires

5.7 Les tableaux

Tableau 2 Bilan massique de la chambre

Nature de la substance	Débit (kg/s)
Matières volatiles et poussières	+1.01
Vapeur d'eau	+0.48
Air tertiaire aux tuyères (imposé)	+2.97
Air primaire + secondaire (imposé)	+0.74
Air par infiltration (calculé)	+0.68
Air à la sortie de la chambre (calculé)	-5.91
Total des entrées et des sorties	-0.03

Tableau 3 Bilan énergétique de la chambre

Origine du gain ou de la perte	Énergie (MW)
Matières volatiles, les poussières et la vapeur d'eau (imposée)	+3.24
Combustion des matières volatiles et des poussières de coke(calculée)	+11.64
Gaz chauds à la sortie de la chambre (calculé)	-10.35
Transfert au lit et aux réfractaires (calculé)	-4.63
Totals des gains et des pertes	-0.1

Tableau 4 Bilan massique du lit de coke

Nature de la substance	Débit (kg/s)
Coke vert à l'entrée (imposé)	+5.63
Coke calciné à la sortie (calculé)	-5.63
Total de l'entrée et de la sortie	< +0.001

Tableau 5 Bilan énergétique du lit de coke

Origine du gain ou de la perte	Énergie (MW)
Coke vert à l'entrée (imposé)	+0.211
Surface du lit de coke (calculé)	+4.301
Coke calciné à la sortie (calculé)	-4.517
Transfert par les réfractaires (calculé)	+0.000115
Total des gains et des pertes	-0.005

Tableau 6 Bilan énergétique des réfractaires

Origine du gain ou de la perte	Énergie (MW)
énergie reçue par rayonnement (imposé)	+0.627
énergie perdue dans l'environnement (calculé)	+0.597
énergie nette transmise au lit de coke (calculé)	-118
Total des gains et des pertes	0.044

6 Conclusion

Un modèle à 3D du four de calcination du coke de pétrole a été construit. C'est un modèle complexe conçu de façon modulaire, où tous les modules sont statiques sauf celui des réfractaires, qui doit être dynamique. Un grand nombre de sous-modèles greffés sur le modèle de la chambre sont requis pour décrire les phénomènes connexes. Quatre maillages différents sont utilisés pour discrétiser la chambre, le lit de coke, les réfractaires et pour définir les zones requises dans le calcul du transfert radiatif. Des précautions sont prises à différentes étapes pour contourner les difficultés de convergence.

Cette complexité du modèle est le prix à payer pour lui assurer une bonne représentativité. En plus de la construction modulaire, des efforts ont été exercés pour rendre le modèle plus accessible; c'est le cas des interfaces pour la génération de maillages, ou encore de la représentation graphique des résultats de simulation.

Deux validations ont été réalisées. Une validation préliminaire a été faite sur le four de l'Université de Colombie Britannique. La validation suivante, plus détaillée, fut faite avec des résultats de la campagne de mesures d'octobre 1990 sur le four no. 2 de l'usine Arvida. De toute évidence, si l'occasion se présente d'effectuer une autre validation, la crédibilité du modèle en sera accrue, et par la même occasion d'autres améliorations pourront être apportées au modèle.

Le nouveau modèle de combustion présente plusieurs avantages sur l'ancien modèle. Comme en fait de foi la comparaison avec les résultats précédents donnés en annexe. La variation de la concentration de chaque composé chimique est maintenant régie par une équation cinétique qui lui est propre. Ce qui représente une amélioration majeure tant au niveau de la répartition de l'énergie que de la prédiction des espèces chimiques présentes à la sortie du four.

Le modèle 3D a été récemment utilisé pour faire une étude de faisabilité sur le recyclage des poussières sous-calcinés en les réinjectant dans l'air primaire et secondaire. D'autres études semblables pourront être faites ce qui permettra d'éprouver le modèle.

Pour des modèles de cette taille, il y a toujours de la place pour amélioration. Le modèle de combustion en est un exemple. On parle souvent de dilemme entre la représentativité du modèle et son accessibilité. Nous croyons qu'un équilibre a été atteint avec le modèle dans son état actuel. Pour améliorer encore l'accessibilité, un manuel de l'utilisateur est en voie de rédaction.

Bibliographie

- [1] J. Perron et B. Desgroseilliers, "Campagne de mesures d'octobre 1990 sur le four no.2 de calcination du coke à Arvida: 2. les données et méthodes de mesure," Rapport no. AR-91/0050, Alcan International Ltée, 1991.
- [2] J. Perron, *Modèle mathématique d'un four de calcination du coke de pétrole*. Thèse de PhD, École Polytechnique de Montréal et Université du Québec à Chicoutimi, 1991.
- [3] J. Perron, V. Potocnik, et R. Bui, "Modelling of the coke calcining kiln," in *Int. Symp. on Reduction and Casting of Aluminium*, vol. 8, pp. 87–98, CIM Proceedings, 1988.
- [4] J. Perron, R. Bui, et H. Nguyen, "Modélisation mathématique d'un four de calcination du coke de pétrole: 1. le modèle," *J.C.G.Ch*, 1992. sous presse.
- [5] J. Perron, R. Bui, et H. Nguyen, "Modélisation mathématique d'un four de calcination du coke de pétrole: 2. la simulation," *J.C.G.Ch*, 1992. sous presse.
- [6] J. Perron et R. Bui, "Rotary cylinders : Transverse bed motion prediction by rheological analysis," *J.C.G.Ch*, 1992. sous presse.
- [7] J. Perron, L. Castonguay, R. Bui, et H. Nguyen, "Optimization of coke calcining kiln operation using mathematical modelling," in *Light Metals*, pp. 559–563, AIME, 1990.

- [8] R. Bui, G. Simard, Y. Kocaefe, A. Charette, M. Lacroix, S. Jain, J. Perron, A. Proulx, et P. Barr, "3D Simulation of the thermal performance of a coke calcining kiln," in *Int. Symp. on Extraction, Refining and Fabrication of Light Metals*, vol. 24, pp. 307–314, CIM Proceedings, 1991.
- [9] Y. Kocaefe, G. Simard, R. Bui, A. Charette, V. Potocnik, et J. Perron, "Analyzing the heat transfer in a coke calcining kiln," in *Light Metals*, AIME, 1992. sous presse.
- [10] H. Rosten et D. Spalding, "Beginners's guide and user manual.," Rapport no. TR/100, CHAM Ltd, London, 1986.
- [11] C. Gauthier, "Étude du mouvement granulaire dans un cylindre en rotation," Mémoire de maîtrise en ingénierie, Université du Québec à Chicoutimi, 1991.
- [12] A. Charette et D. Kocaefe, "Study of green coke calcination," Rapport no. GRIPS 92–34, Université du Québec à Chicoutimi, 1992.
- [13] Y. Wu et R. Bui, "Orthogonal curvilinear grid generation for thermo-fluid modelling," Rapport no. GRIPS 91–11, Université du Québec à Chicoutimi, 1991.
- [14] E. Khalil, *Modeling of Furnaces and Combustor*. Abacus Press, 1982.
- [15] A. Hottel, H.C. et Sarofim, *Radiative transfer*. McGraw-Hill Book Company, 1967.
- [16] A. Haidekker, "Radiation modelling in complex three dimensional enclo-

tures,” Mémoire de maîtrise en ingénierie, Université du Québec à Chicoutimi, 1991.

- [17]K. Hoffmann, *Computational fluid dynamics for engineers*. Engineering Education System, 1989.
- [18]D. Spalding, “The phoenics beginner’s guide,” Rapport CHAM TR/100, CHAM, 1991.
- [19]J. Ferron et D. Singh, “Rotary kiln transport processes,” *A.I.Ch.E. Journal*, vol. 37, no. 5, pp. 747–758, 1991.
- [20]G. Simard, Y. Kocaefe, R. Bui, et A. Charette, “Modélisation 3d du calcinateur de coke:Évaluation et validation du modèle pour la campagne de mesure du 11 octobre 1990 sur le four no. 2 d’arvida,” Rapport Rapport no. 23, Université du Québec à Chicoutimi, 1992.

Annexe A Paramètres d'opération

Le modèle a été validé à partir de données expérimentales recueillies le 11 octobre 1990 entre 9:00 et 9:40 AM. Pendant cette période le four de calcination opérait avec les paramètres suivants:

- vitesse de rotation du four 2.5 r/min
- débit d'alimentation du coke vert 21.87 t/h
- débit d'air tertiaire 165 à 185 m³/min à 10 °C (9:13 à 9:17 AM)
- débit d'air secondaire 38 m³/min à 37 °C (9:34 AM)
- débit d'air primaire 3.1 m³/min à 66 °C (9:40 AM)
- débit d'air d'infiltration au niveau du capot four 1.4 à 19.3 m³/min à 34 °C (9:30 AM)
- Pression dynamique à la sortie de la chambre -44 à -48 Pa (9:00 à 9:30 AM)

Il faut considérer la mesure de la pression dynamique comme un paramètre d'opération, puisque la pression négative à la sortie de la chambre contrôle la tire et par conséquent l'imposition de cette valeur comme une condition aux limites permet d'obtenir l'infiltration au niveau du capot du four.

Annexe B Résultats du modèle antérieur reproduits pour fins de comparaison

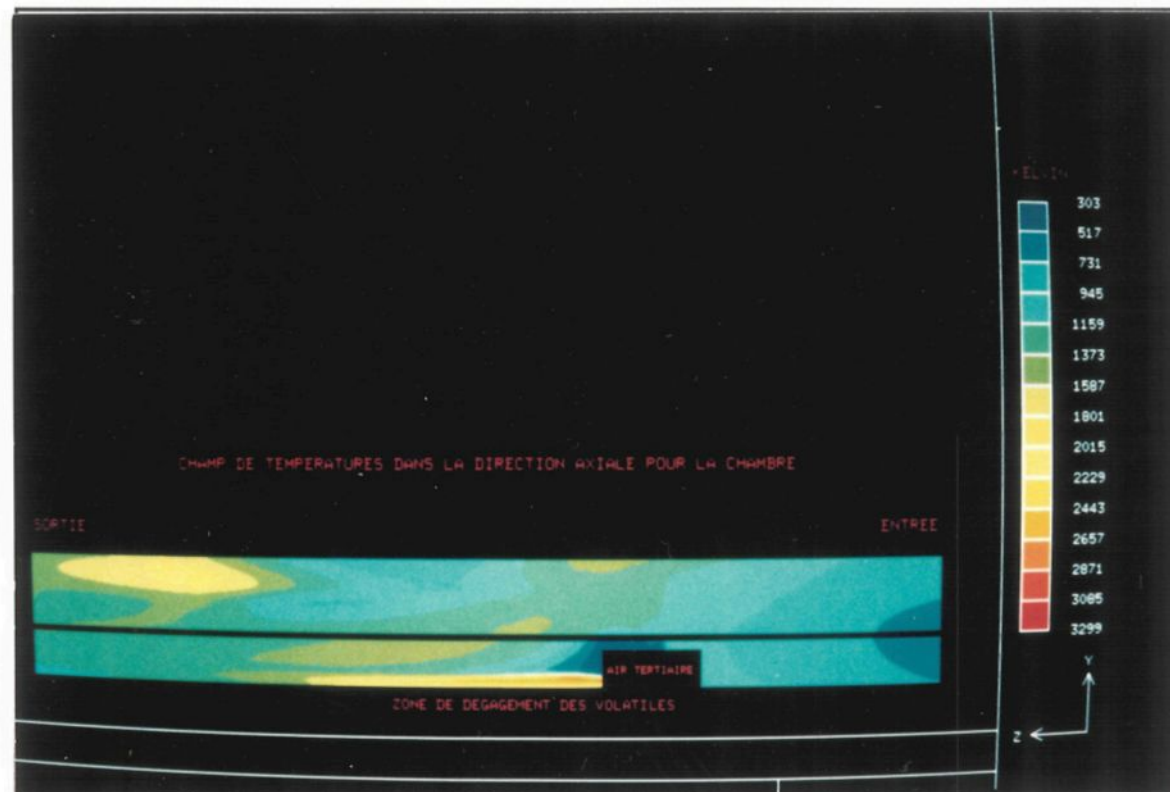


Figure 40 Champ de températures des gaz dans la direction axiale de la chambre

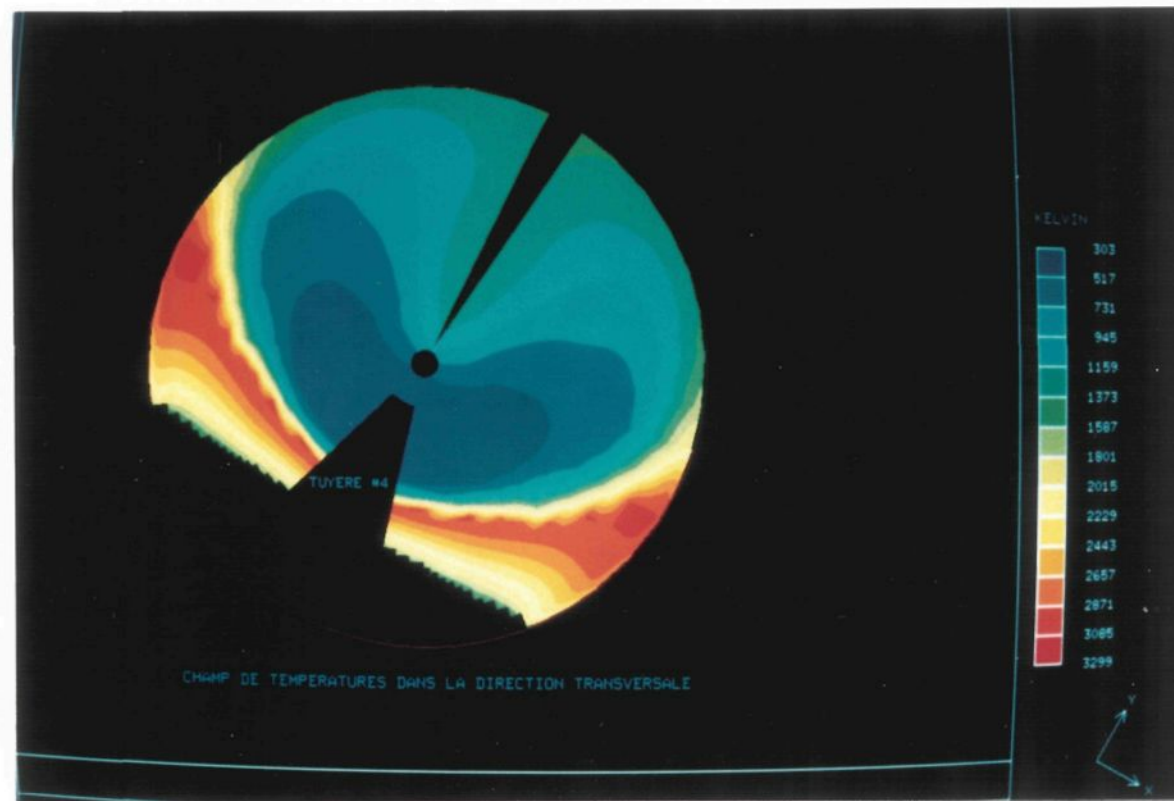


Figure 41 Champ transversal de températures des gaz, au niveau de la tuyère no. 4

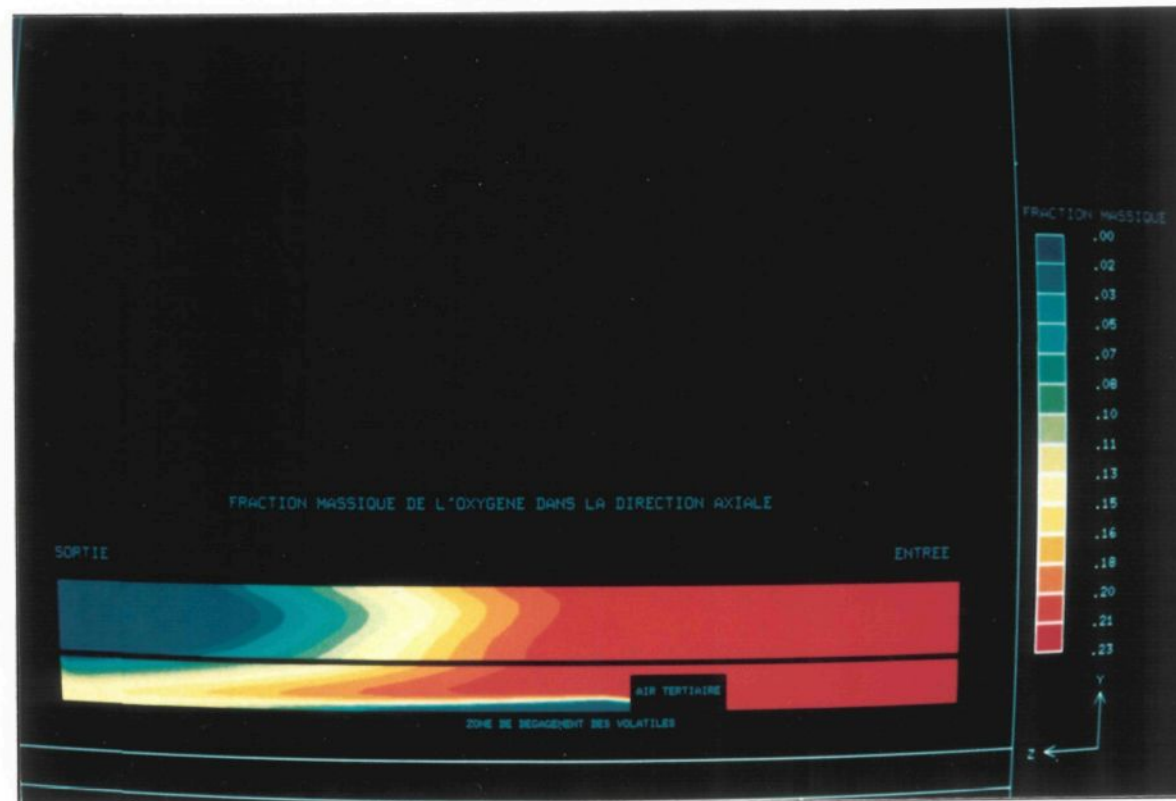


Figure 42 Contours longitudinaux de la fraction massique de l' O_2

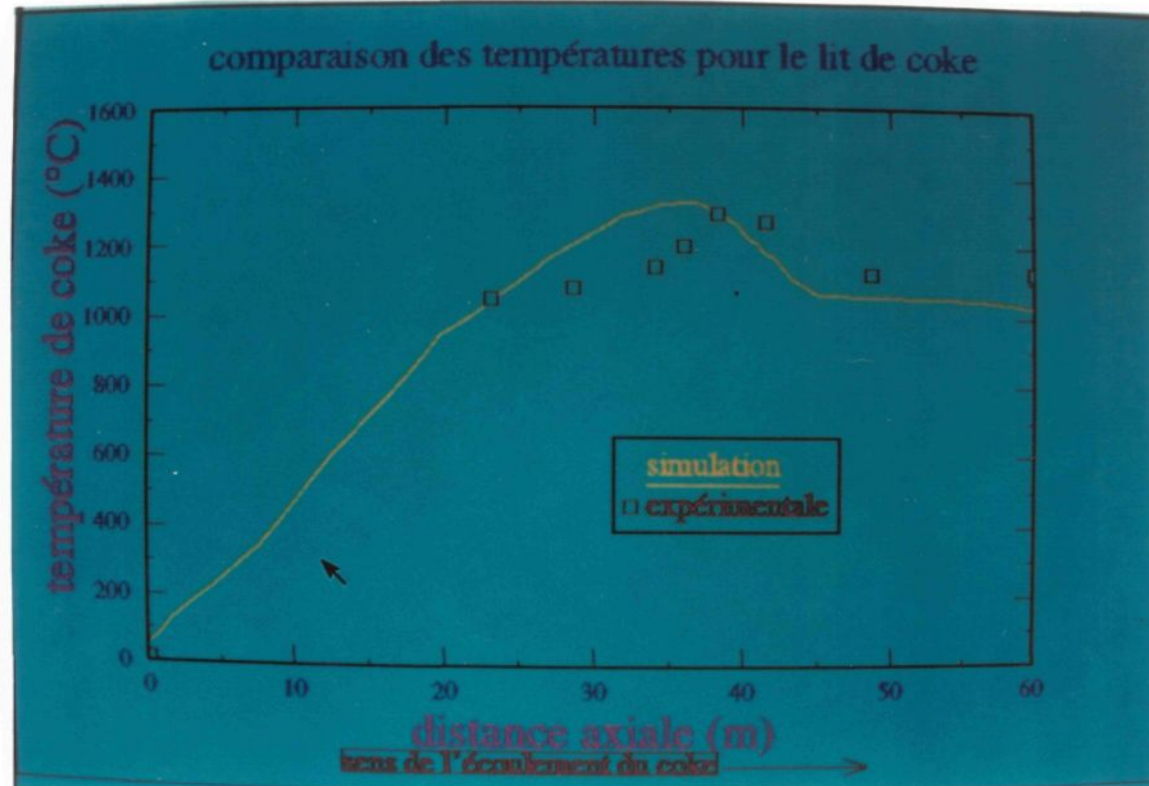


Figure 43 Variation de la température moyenne du lit de coke dans la direction axiale

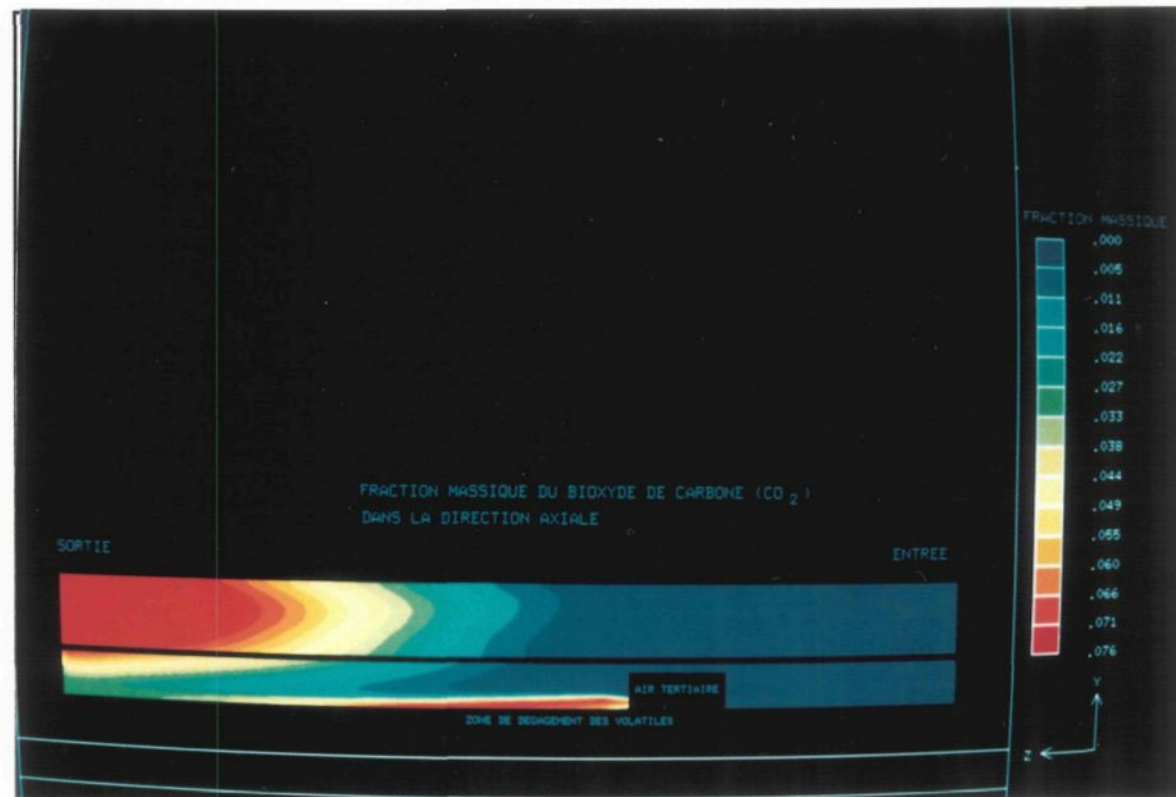


Figure 44 Contours longitudinaux de la fraction massique du CO_2

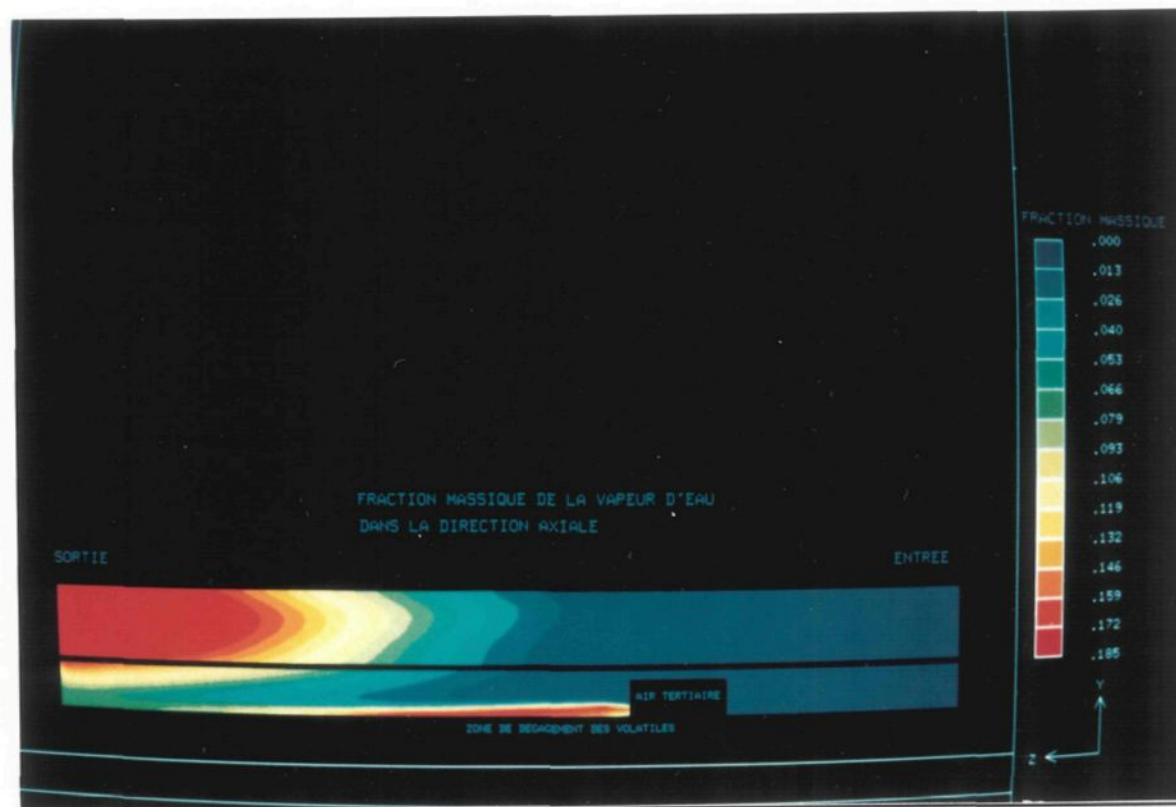


Figure 45 Contours longitudinaux de la fraction massique de la vapeur d' H_2O