

# Komputerowa symulacja procesów zachodzących w komorze koksowniczej

## Computer simulation of the processes taking place in the coke oven chamber

mgr inż. Łukasz SŁUPIK<sup>1</sup>, dr inż. Adam FIC<sup>2</sup>, mgr inż. Grzegorz NOWICKI<sup>1</sup>



### W KILKU SŁOWACH

W artykule przedstawiono model matematyczny procesów cieplnych oraz przepływowych zachodzących podczas koksowania wsadu węglowego w komorze koksowniczej. Model uwzględnia przepływ ciepła na drodze dyfuzji, konwekcji oraz promieniowania. Jednocześnie zamodelowano lokalne procesy odparowania oraz skraplania wilgoci, kinetykę uwalniania części lotnych wraz z towarzyszącymi im efektami energetycznymi. Uzyskane wyniki modelowania pokrywają się z pomiarami eksperymentalnymi wykonanymi na doświadczalnej instalacji pieca z ruchomą ścianą. Model matematyczny opracowano w Instytucie Chemicznej Przeróbki Węgla w Zabrzu w ramach projektu Inteligentna Koksownia.



### SUMMARY

Within article a mathematical model of thermal and flow process occurring within coking chamber is presented. The model encompasses coupled diffusive, convective and radiative heat transfer. At the same time range of aspects associated with carbonization process such as: water evaporation and condensation, kinetics describing release of volatiles accompanied with energy effect are considered. Obtained results coincident well with measurement conducted on the experimental coking chamber. The mathematical model was developed at Institute for Chemical Processing of Coal as a part of the project entitled "Smart Coke Plant Meeting the Requirements of Best Available Techniques".

1) Instytut Chemicznej Przeróbki Węgla  
Zamkowa 1, 41-803 Zabrze  
e-mail: lsłupik@ichpw.zabrze.pl, gnowicki@ichpw.zabrze.pl

2) Instytut Techniki Ciepłej,  
Politechnika Śląska  
Konarskiego 22, 44-100  
Gliwice  
e-mail: adam.fic@polsl.pl

Jakość produkowanego koksu zależy nie tylko od jakości wsadu węglowego, ale także od sposobu prowadzenia procesu. Od sposobu prowadzenia tego procesu zależy ponadto jego energochłonność oraz żywotność baterii koksowniczej. Wszystko to ma wpływ na efekty ekonomiczne koksowni. Dlatego problemy dotyczące optymalizacji, prowadzenia procesu koksowania były przedmiotem wielu badań, opartych dawniej głównie o doświadczenia eksploatacyjne i eksperymenty. Ponad 30 lat temu pojawiły się też próby modelowania matematycznego procesu koksowania, początkowo

bardzo uproszczone. Później, w miarę rozwoju techniki komputerowej były one coraz dokładniejsze, a od ponad 10 lat wykorzystuje się w tym celu także metody Numerycznej Mechaniki Płynów (NMP, z ang. Computational Fluid Dynamics - CFD) [1]. Z uwagi na stopień skomplikowania procesu koksowania, budowane dotąd modele tego procesu oparte były na licznych założeniach upraszczających. Wykorzystywanie tych modeli do celów praktycznych, np. do wspomaganie procesu eksploatacji baterii koksowniczej, wymaga dalszego ich doskonalenia i walidacji. W ramach projektu kluczowego „Inteligentna





koksownia spełniająca wymagania najlepszej dostępnej techniki”, koordynowanego przez Instytut Chemicznej Przeróbki Węgla w Zabrze, podjęto kolejną próbę tego typu badań.

Klasyczna technologia koksownicza polega na beztlenowym ogrzewaniu odpowiednio skonfigurowanej mieszanki węglowej do temperatury około 1000 °C. Proces ten jest realizowany w baterii komór koksowniczych. Ciepło niezbędne do przeprowadzenia procesu dostarczane jest do komory z kanałów grzewczych poprzez ceramiczną ścianę. Źródłem tego ciepła jest spalany w kanałach grzewczych gaz koksowniczy. Na początku procesu gazem wypełniającym pory wsadu jest powietrze. Później pojawia się tam para wodna oraz uwalniane w procesie odgazowania substancje lotne. Równocześnie para podlega przejściowo skraplaniu w chłodniejszych partiach wsadu. Następują również we wsadzie takie procesy, jak polimerizacja, cyklizacja, czy izomeryzacja. Tym przemianom fazowym i reakcjom chemicznym zachodzącym w procesie koksowania towarzyszą znaczne efekty energetyczne. Zjawiska te wpływają również istotnie na gęstość wsadu. Zmiana struktury wsadu wpływa na opory przepływu gazów i znaczenie różnych form przepływu ciepła. Tak duża liczba silnie sprzężonych zjawisk zachodzących podczas koksowania, nie do końca dotąd dostatecznie dokładnie ilościowo zidentyfikowanych, a wpływających istotnie na przebieg tego procesu, stanowi o trudnościach jakie pojawiają się podczas jego numerycznego modelowania. Ponadto procesy zachodzące w komorze koksowniczej są silnie sprzężone z procesami występującymi w sąsiadujących z nią kanałach grzewczych.

Przedstawiony w niniejszym artykule model matematyczny komory koksowniczej uwzględnia dyfuzyjną, konwekcyjną i radiacyjną wymianę ciepła we wsadzie komory, przepływ w niej gazów, uwalnianie części lotnych, dyfuzyjny transport wilgoci, jej odparowanie i wtórne, lokalne skraplanie, efekty cieplne odgazowania i przemian fazowych, a także tworzenie się przysięciennej szczeliny gazowej. Do jego budowy zastosowano model Archeniusa [2] kinetyki pirolizy. Kinetyka odparowania i skraplania wilgoci została zaś zamodelowana przy wykorzystaniu zmodyfikowanej formuły Hertza-Knudsen [3].

Ostatecznie model matematyczny został zaimplementowany na platformie komercyjnego pakietu CFD ANSYS Fluent [4]. W badaniach podjęto też próbę walidacji i kalibracji modelu poprzez porównanie wyników obliczeń numerycznych z wynikami pomiarów wykonanych w Centrum Pirolizy (Centre de Pyrolyse de Marienau) w Forbach, we Francji, na eksperymentalnym stanowisku wyposażonym w komorę koksowniczą ogrzewaną elektrycznie.

Opracowany model matematyczny komory koksowniczej zbudowano w oparciu o szereg założeń upraszczających z ,których najważniejsze to:

- przedmiotem modelowania jest pojedyncza komora koksownicza zasilana ciepłem z sąsiadujących kanałów grzewczych poprzez dwie ściany grzewcze,
- model komory jest dwuwymiarowy,
- biorąc pod uwagę identyczne warunki przekazywania ciepła przez obie przeciwległe ściany komory testowej oraz osiową symetrię, model numeryczny obejmuje wyłącznie wewnętrzną połowę komory,
- załadowany do komory wsad traktuje się jak ośrodek porowaty, a mieszanina gazów wypełniających pory jest gazem doskonałym,
- na początku procesu gazem wypełniającym pory jest powietrze, które następnie miesza się z powstającą parą wodną oraz uwalnianymi z węgla w procesie pirolizy substancjami lotnymi, takimi jak:  $\text{CH}_4$ ,  $\text{C}_2\text{H}_6$ ,  $\text{H}_2$ ,  $\text{H}_2\text{O}$ ,  $\text{CO}$ ,  $\text{CO}_2$ ,  $\text{NH}_3$ ,  $\text{H}_2\text{S}$ , BTX (benzen, toluen, ksylen) oraz smoła zastąpiona przez naftalen,
- przepływ uwalnianych w czasie procesu gazów jest traktowany jako laminarny,
- mieszanina gazowa i ziarna wsadu znajdują się w równowadze termicznej, co oznacza, że lokalne wartości temperatury wsadu i gazu są takie same,
- w komorze występuje sprzężony dyfuzyjny, konwekcyjny i radiacyjny przepływ ciepła,
- w modelu uwzględniono dyfuzyjny transport wilgoci, czyli jej odparowanie wraz z wtórnym skraplaniem,
- kinetyka uwalniania substancji lotnych jest opisana za pomocą równania Arrcheniusa,
- odparowaniu wilgoci, skraplaniu pary oraz uwalnianiu substancji lotnych towarzyszą efekty cieplne,



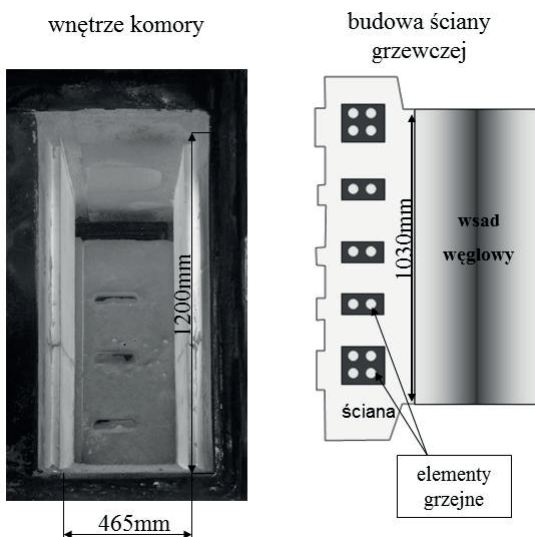


- w modelu uwzględniono endotermiczne oraz egzotermiczne efekty reakcji towarzyszące uwalnianiu części lotnych,
- pod koniec procesu powstaje przyścienna szczelina gazowa na skutek skurczu bryły koksowej,
- w modelu pominięto efekty fizyczne wiążące się z lokalnym odparowaniem i skraplaniem smoły.

Przy przyjętych założeniach, problem nieustalonego transportu ciepła i masy w komorze koksowniczej został opisany następującymi równaniami [4]:

- równanie ciągłości dla mieszaniny gazowej,
- równanie pędu dla gazu,
- równanie transportu dla poszczególnych składników mieszaniny gazowej,
- równanie energii,
- równanie dyfuzji wilgoci w wsadzie węglowym,
- równanie Arrheniusa.

Budowę modelu rozpoczęto od przygotowania dwuwymiarowego modelu geometrycznego wewnętrznej części pieca eksperymentalnego, którego wewnętrzną część wraz z budową ściany grzewczej przedstawiono na rysunku 1.



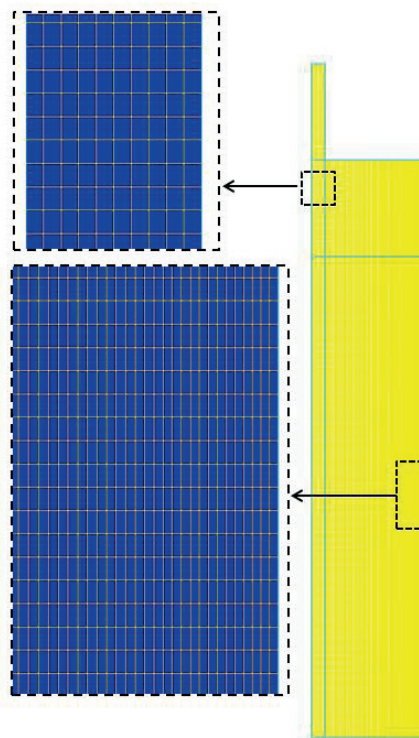
Rys. 1. Eksperymentalna komora testowa zlokalizowana w Center de Pyrolyse de Marienau (CPM), Francja.

Najbardziej istotne szczegóły techniczne komory eksperymentalnej można streścić w następujących punktach:

- możliwość koksowania wsadu zasypowego oraz ubijanego,
- ściany ogrzewane elektrycznie,
- automatyczna kontrola temperatury,

- temperatura w kanałach grzewczych utrzymywana jest w przedziale: od 1000 °C do 1300 °C,
- możliwość zmiany szerokości komory w zakresie od 400 mm do 700 mm,
- ciężar ładunku węglowego od 350 kg do 600 kg,
- możliwość pomiaru temperatury wewnątrz wsadu, ciśnienia gazu wewnątrz warstwy plastycznej, ciśnienia rozprężania oraz skurczu poprzecznego.

Ażeby móc rozwiązać zdefiniowany wcześniej układ równań należy dla zadanej dwuwymiarowej geometrii modelu zbudować siatkę podziału numerycznego. W związku z tym wygenerowano siatkę typu HEX, składającą się łącznie z 28 tysięcy elementów, rysunek 2. Dodatkowo w obszarze przyściennym komory zagęszczono ją ze względu na potrzebę odwzorowania bardzo intensywnego procesu odparowania wilgoci oraz wydzielania części lotnych mających miejsce w pierwszych godzinach procesu. Należy również pamiętać, iż pod koniec procesu w tych samych warstwach przyściennych ma miejsce powstawanie wąskiej przyściennej szczeliny w której następuje zintensyfikowany przepływ gazów procesowych.



Rys. 2. Strukturalna numerycznej siatki rozważanego modelu matematycznego komory.



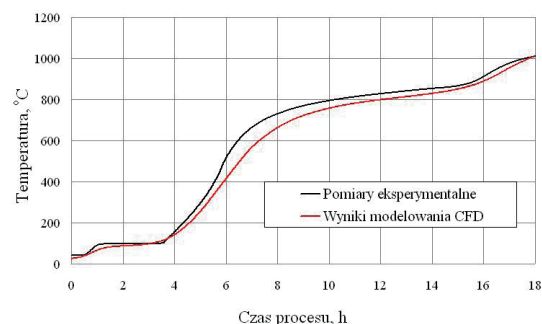


Stałe termofizyczne dla mieszaniny gazowej, takie jak ciepło właściwe, współczynnik przewodzenia ciepła, dynamiczny współczynnik lepkości wyznaczono korzystając z zależności zaimplementowanych w programie Fluent. Efektywny współczynnik przewodzenia ciepła dla porowatego wsadu węglowego uzależniono od temperatury, zawartości wilgoci oraz zmiany porowatości całkowitej [5]. Z kolei pojemność cieplną węgla uzależniona jest od temperatury oraz aktualnej zawartości części lotnych według formuły zaproponowanej przez Eisermanna [6]. Całkowita gęstość wsadu roboczego wyznaczana jest biorąc pod uwagę jej początkową gęstość roboczą, aktualną zawartość wilgoci oraz części lotnych.

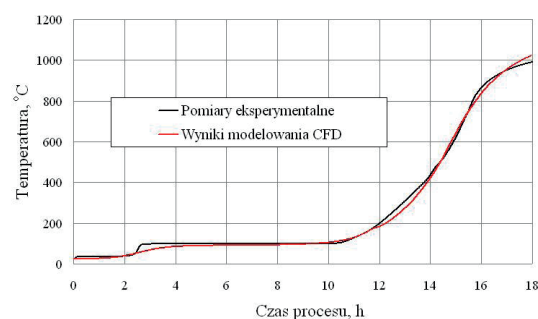
Do rozwiązywania równań ciągłości, momentów, transportu poszczególnych substancji gazowych i energii, wykorzystano algorytmy pakietu CFD ANSYS Fluent. Równanie opisujące dyfuzję wilgoci rozwiązywano zaś wykorzystując tzw. UDS (User Defined Scalar). Jest to narzędzie kodu Fluent, za pomocą którego można rozwiązywać dowolne równania nieustalonego transportu wielkości skalarnej zawierające składniki akumulacyjne, adwekcyjne, dyfuzyjne i źródłowe. Pozostałe elementy opisanego modelu, dotyczące kinetyki uwalniania części lotnych, warunków brzegowych, definicji stałych termofizycznych i wyrażeń źródłowych zaimplementowano wykorzystując tzw. UDFs (User Defined Function). Są to specjalnie skonstruowane funkcje do definiowania tego typu wielkości, pisane w języku C, które po skompilowaniu można dołączać do kodu źródłowego. Przy rozwiązywaniu opracowanego modelu pracy komory koksowniczej wykorzystywano równocześnie tzw. UDMs (User Defined Memory). Jest to narzędzie kodu Fluent pozwalające rezerwować dodatkowe obszary pamięci do przechowywania wartości w węzłach siatki zmiennych definiowanych przez użytkownika, np. za pomocą UDFs. Zmienne te są później dostępne dla UDFs, jak również dla postprocesora umożliwiającego graficzne prezentowanie pól.

Przeprowadzenie pomiarów temperatur na przemysłowej komorze jest stosunkowo trudnym zadaniem podczas ciągłej pracy baterii koksowniczej. Termoelementy włożone do

wsadu węglowego przemieszają się na skutek występowania takich zjawisk jak: ciśnienie rozprężania oraz skurcz bryły koksowej. Ponadto praktycznie niemożliwy jest pomiar szerokości przyściennej szczeliny gazowej powstającej pod koniec procesu. W związku z powyższym zdecydowano, że na potrzeby walidacji i kalibracji modelu matematycznego wykorzystane zostaną wyniki pomiarów wykonanych w Centrum Pirolyzy w Forbach, we Francji na eksperymentalnym stanowisku wyposażonym w komorę koksowniczą ogrzewaną elektrycznie. W czasie eksperymentu regulowana szerokość komory wynosiła 465 mm. Wsad stanowiła mieszanka krajowych oraz zagranicznych węgla o zawartość wilgoci wynoszącej 5 %, popiołu 8 % oraz całkowitych części lotnych w stanie suchym i bezpopiołowym 26 %. Proces koksowania prowadzono przez 18 h aż do osiągnięcia temperatury w osi komory równej około 1000 °C. Podczas eksperymentu mierzono temperaturę wewnątrz wsadu (w osi oraz w ¼ szerokości komory). Jednocześnie dokonano pomiaru temperatury na powierzchni wewnętrznej ściany grzewczej komory (od strony wsadu). Przebieg temperatur zmierzonych w czasie eksperymentu porównano z wynikami uzyskanymi z prezentowanego modelu matematycznego komory, rysunek 3 i 4.



Rys. 3. Porównanie przebiegu temperatury pomiarowej i obliczeniowej dla 1/4 szerokości komory.



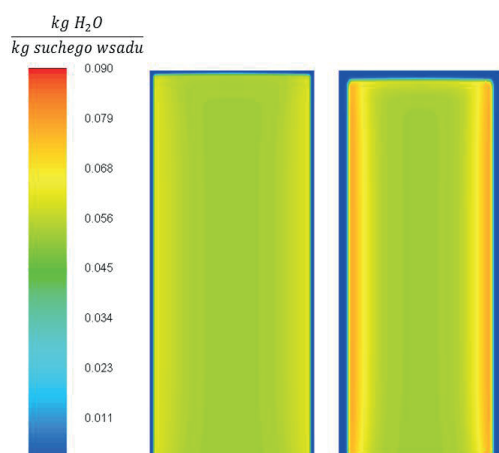
Rys. 4. Porównanie przebiegu temperatury pomiarowej i obliczeniowej w osi komory.

Uzyskano bardzo dobrą zgodność modelu matematycznego z pomiarami temperatur wykonanymi dla 1/4 szerokości komory jak i dla jej osi. W sposób zadowalający odwzorowano pierwszy etap procesu, czyli izotermiczne odparowanie wilgoci oraz występujący bezpośrednio po nim proces uwalniania części lotnych.

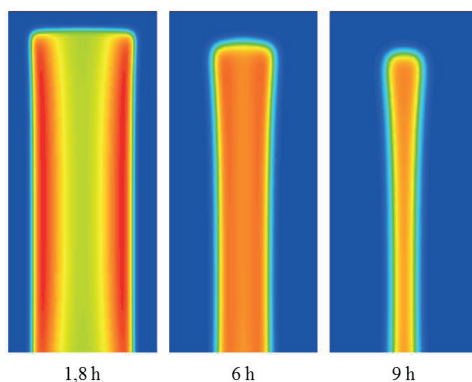
Pozostałe wyniki obliczeń symulacyjnych w komorze koksowniczej, dla różnych momentów czasowych procesu koksowania, przedstawiono na rysunkach 5-9. Biorąc pod uwagę przyjęte założenia uzyskane wyniki symulacji są fizycznie poprawne. Dotyczy to wszystkich argumentów prezentowanych na rysunkach:

- zawartości wilgoci we wsadzie odniesionej do jednego kilograma suchego węgla (rys. 5),
- udział całkowitych części lotnych we wsadzie odniesionego do jednostkowej ilości węgla w stanie suchym oraz bezpopiołowym (rys. 6),
- położenia warstwy plastycznej, wyrażonej poprzez współczynnik oporu lepkiego (rys. 7),
- rozkładu pól temperatur (rys. 8),
- prędkości gazu w jej szczelinie przyściennej i jej okolicy (rys. 9).

Należy podkreślić, iż po raz pierwszy w sposób wiarygodny zasymulowano pierwszy etap procesu koksowania jakim jest odparowanie wilgoci. Jak można zaobserwować na rysunku 5, odniesiony do jednostki ilości węgla suchego, masowy udział wilgoci stopniowo zwiększa się wraz z postępowaniem procesu w stosunku do jej początkowej wartości (kolor jasno zielony). Jest to wynik przejściowego skraplania pary, która powstała w wyniku odparowania wilgoci z zewnętrznych warstw wsadu (kolor pomarańczowy oraz czerwony).

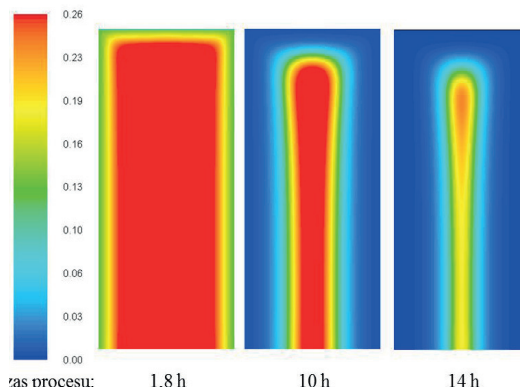


Po odparowaniu wilgoci gdy temperatura



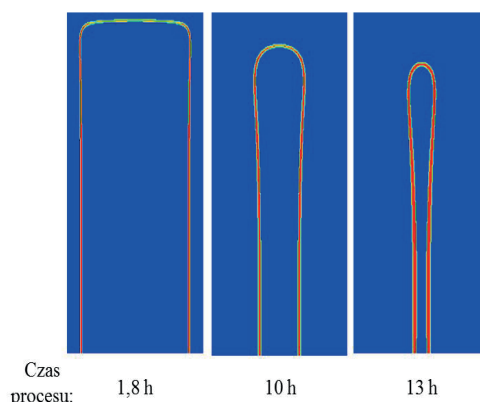
Rys. 5. Przykładowy rozkład udziałów masowych wilgoci we wsadzie komory koksowniczej dla różnych czasów koksowania.

wsadu przekroczy 200 °C, następuje stopniowe uwalnianie części lotnych z węgla, prowadzące do znaczących zmian w gęstości wsadu. Na rysunku 6 zobrazowano aktualną zawartość części lotnych pozostającą we wsadzie dla różnych czasów procesu.



Rys. 6. Rozkład całkowitych części lotnych we wsadzie komory dla różnych czasów koksowania, wyrażony w kg części lotnych przypadających na 1 kg węgla w stanie suchym oraz bezpopiołowym.

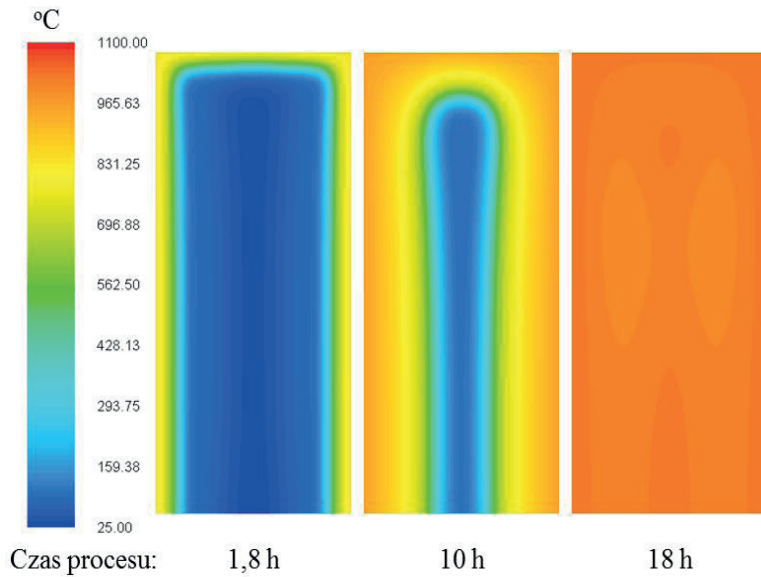
W przyjętym modelu procesu koksowania założono, iż w zakresie temperatur od 400 °C do 500 °C powstaje warstwa plastyczna (rys. 7), którą zamodelowano poprzez odpowiednie zwiększenie oporów przepływu gazu w rozważanym przedziale temperatur.



Rys. 7. Przykładowe rozkłady położenia warstwy plastycznej dla różnych etapów koksowania.

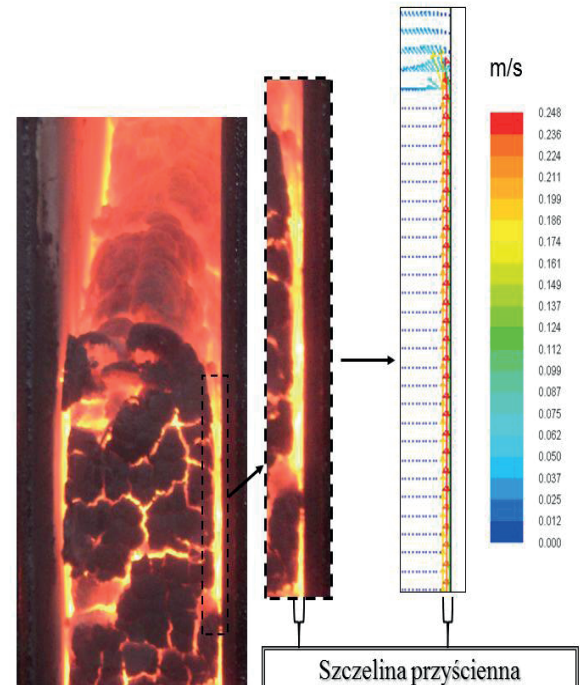
Literatura:

- [1] Chung T. J.: "Fluid Dynamics", Cambridge University Press, 2002.
- [2] Laider K.J.: "Chemical Kinetics", Benjamin Cummings, 1997.
- [3] Clayton C.T.: "Multiphase Flow Handbook", CRC Press Taylor & Francis, Boca Raton, US, 2006.
- [4] User's guide of ANSYS Fluent 12, Release 14.0, © ANSYS, Inc., 2012.
- [5] Atkinson B, Merrick D.: "Mathematical models of the thermal decomposition of coal, 4. Heat transfer and temperature profiles in coke-oven charge", Fuel, 62, (1983), pp. 553-561.
- [6] Eisermann W., Johnson P., Cogner W.L.: "Estimating thermodynamic properties of coal, char, tar and ash", Fuel Processing Technology, 3, str. 39-53, 1980.
- [7] Jacek Smolka, Łukasz Słupik, "Model matematyczny procesów cieplno przepływowych w kanałach grzewczych baterii koksowniczej PWR-63", Piec przemysłowy & kotły, 1/2, 2013.



Rys. 8. Rozkład pól temperatur wewnątrz komory dla różnych czasów koksovania.

Ubytek masy wsadu węglowego wynikający z odparowania oraz procesu pirolizy prowadzi w ostatniej fazie procesu do skurczu bryły koksowej oraz powstania przyściennej szczeliny co zostało zobrazowane na rysunku 9.



Rys. 9. Zdjęcie wnętrza komory koksovniczej oraz wyniki obliczeń wektorowego pola prędkości w okolicach szczeliny przyściennej.

## 20 lat doświadczenia w fotografii przemysłowej



zapraszamy do współpracy  
fotografia artystyczna i reklamowa

**Piotr Komander**  
tel. +48 601 438 404

[www.komander.com.pl](http://www.komander.com.pl)

### Podsumowanie

W ramach projektu Inteligentna Koksownia opracowano model numeryczny procesów cieplnych i przepływowych zachodzących podczas koksovania wsadu węglowego w komorze koksovniczej. Model uwzględnił dyfuzyjną, konwekcyjną oraz radiacyjną wymianę ciepła. Zasymulowano również proces odparowania i skraplania wilgoci oraz wydzielanie części lotnych wraz z towarzyszącymi im efektami energetycznymi. Wyniki modelowania porównano z pomiarami temperatur wykonanymi w Centrum Pirolizy w Francji. Uzyskano zadowalającą zgodność przebiegów temperatury obliczeniowej i eksperymentalnej. Zaprezentowany model komory można z powodzeniem wykorzystać do przeprowadzenia obliczeń sprzężonych z opracowanym wcześniej modelem kanałów grzewczych [7].

