

코크스 공정에서의 열유동 현상 모델링

양광혁[†]·양원*·최상민**

Modeling of Coking Process in a Coke Oven

Kwangheok Yang, Won Yang and Sangmin Choi

Key Words: Coke oven(코크 오븐), Modeling(모델링), Coking process(코크스 공정)

Abstract

Coking process is the thermal decomposition of bituminous coal with final temperature of about 900°C. Because coke plays important roles in ironmaking process in a blast furnace it's essential for developing modeling of coke oven. In this study, An unsteady 2-dimesional model is proposed to simulate coking process in a coke oven. In this model, gas and solid phase are assumed homogeneous continuum and solid bed is assumed as porous media. The model contains governing equations for the solid phase and the gas phase. Complicated phenomena such as swelling, softening, resolidification and shrinkage are neglected and mass loss by drying and devolatilization is reflected by generation of internal pores. Drying, devolatilization, heat transfer and generation of internal pores are also reflected in source terms. Calculated results are compared with experimental data.

기호설명

Alphabets

E : 활성화 에너지 (J/kmol)
 Dp : 입자크기, m
 h : 엔탈피, J ; 대류열전달 계수, W/m²K
 k : 열전달 계수 (W/m-k) ; 반응속도계수(/s)
 M : 단위부피당 질량생성률, kg/m³s
 p : 압력, N/m²
 R : 기체상수
 S : 소스항
 t : 시간, s
 u,v : 속도(m/s)

Greeks

ϵ : 기체상의 부피분율
 Γ : diffusion coefficient
 μ : 점성도
 ρ : 밀도, kg/m³

Subscripts

g : 가스상
 ip : 내부기공
 j : 가스상에서의 화학 성분
 s : 고체상
 s→g : 고체상에서 기체상

1. 서론

코크스는 제철 공정에서 크게 세가지의 역할을 하게 된다. 철광석 내 철성분은 산소와 결합된 형태이므로 철을 만들기 위해서는 반드시 고로에서 환원과정을 거쳐야 하며 이 때 코크스의

[†] 한국과학기술원 기계공학과

E-mail : iop45@kaist.ac.kr

TEL : (042)869-3070 FAX : (042)869-3210

* 한국과학기술원 기계공학과

** 한국과학기술원 기계공학과

탄소가 그 자체로 환원제 역할을 하거나 산소와 반응하여 일산화탄소로서 산화물 형태의 철광석을 환원시키는 작용을 한다. 또한 고로 내부에 투입된 코크스가 송풍구로 공급된 공기 중의 산소와 발열반응을 일으켜 장입물의 용융 및 환원에 필요한 열량을 공급한다. 마지막으로 철광석이 용융되기 전 고로 상부의 덩어리 상태에서 코크스의 크기는 철광석보다 크므로 고로 내부 가스 흐름의 균일함과 원활함을 좌우하는 중요한 인자이며, 이 코크스의 입도와 강도에 의해 고로의 안전 조업, 생산성 등에 영향을 미친다. 또한 고로 하부에서 장입물은 용융돼 액체 상태로 존재하게 되고 코크스만이 고체 상태로 존재하므로 쇳물과 슬래그가 원활하게 노상으로 떨어질 수 있는 공간을 확보하는 역할을 한다.

일반적으로 코크스는 수직형 슬롯형태(slot-type)의 오븐에서 석탄을 건류하여 생산한다. 오븐은 높이 8m, 길이 15m, 폭 0.45m의 크기를 가지고 에너지와 공간의 절약을 위해 하나의 코크스 공장은 약 10-100개의 오븐으로 구성된다. 원료탄으로는 0.3mm이하의 역청탄(bituminous coal)을 사용하며 열분해에 필요한 열원을 공급하기 위하여 연소실에서 COG와 BFG를 혼합하여 연소시킨다.(1,2)

Fig.1에서는 코크 오븐 내에서 일어나는 주요 현상을 나타내었다. 일단 벽면에서 전달되는 열량에 의해 석탄의 온도가 올라가게 되고 100°C에 이르게 되면 온도는 그대로 유지된 채 수분 증발이 일어나게 된다. 수분 증발이 모두 끝나면 다시 석탄의 온도가 상승하고 350°C가 되면 열분해가 일어나기 시작하고 연화가 시작된다. 400°C부터는 본격적으로 가스, 타르등으로 열분해가 일어나고 plastic stage가 된다. 500°C에서 가스의 방출이 최대 일어나고 또한 swelling이 일어나게 된다. 온도가 더 올라가서 550°C정도가 되면 고화가 일어나고 다공성의 semi-coke를 형성하게 되고 700°C에서는 많은 양의 수소가 방출된다. 가열이 계속되면 수축이 일어나고 기공과 균열이 자라고 최종 생성물인 코크스가 형성되게 된다. 코크스 공정은 일반적으로 900°C이상에서 30분이 지나면 완료된 것으로 가정한다. 1000°C이상의 온도에서의 장시간 노출은 기공을 없애 코크스의 반응성을 감소시킬 가능성이 있기 때문에 피하는 것이 좋다.

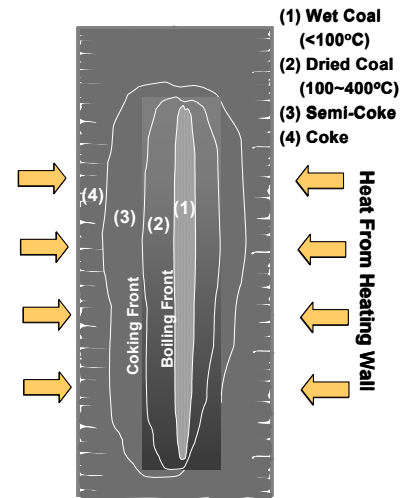


Fig. 1 Phenomena in coke oven

이와 같이 코크스 공정에서의 실제 현상은 매우 복잡하기 때문에 오븐내에서의 열유동 특성을 모사하기 위해서는 단순화된 형태의 모델이 필요하게 된다. 초기에는 코크오븐에서의 폭 방향의 열전달이 지배적이라는 가정에 의해 주로 1차원 전열모델(3)이 많이 사용되었다. 하지만 코크스공정에서 사용되는 장입탄은 일반적으로 많은 양의 수분(~8%)과 휘발분(~30%)을 포함하고 있기 때문에 방출된 가스에 의해 열전달이 영향을 받게 된다. 그러므로 이 영향을 고려해 주기 위해서는 2차원 해석이 필요하게 된다.

본 연구에서는 코크 오븐의 모델링을 위한 수학적 모델을 제시하고 그 결과를 통해 모델의 타당성을 검증하고자 한다.

2. 모델링

2.1 문제 정의

Fig. 2에 코크오븐의 해석을 위한 계산 조건을 나타내었다. 장입탄의 층을 균일한 다공층(porous media)로 가정하였다. 고체상의 층의 높이, 형상 등은 변하지 않는 것으로 가정하였고, 수분증발과 탈휘발 과정을 고려하였다. 또한 수분증발과 탈휘발에 의한 질량 손실은 모두 내부기공의 형성으로 반영하였다. 좌우 대칭이므로 계산 영역은 오븐의 반에 대해서만 생각해 주었다. 상은 고체상과 기체상으로 나누어 각각에 대해 지배방정식을 세우게 된다.

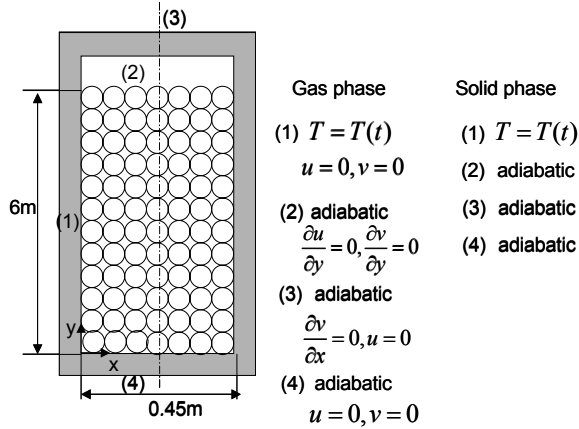


Fig. 2 Problem definition

2.2 지배 방정식

지배 방정식은 기체상과 고체상에 대하여 2차원 형태의 편미분 방정식 형태를 사용하였다. 속도는 평균 면적 속도(Darcian of superficial velocity)를 사용하였으며, 기체상이 차지하는 부피 분율, 즉 void fraction을 ϵ 이라 하면 고체상과 기체상에서 스칼라량 ϕ 에 대해 각각 다음과 같은 형태의 일반화 된 방정식을 사용할 수 있다.

고체상 :

$$\frac{\partial(\rho(1-\epsilon)\phi)}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho\phi\bar{u}) = \nabla \cdot (\Gamma_{eff} \nabla \phi) + S_\phi$$

기체상 :

$$\frac{\partial(\rho\epsilon\phi)}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho\phi\bar{u}) = \nabla \cdot (\Gamma_{eff} \nabla \phi) + S_\phi$$

각각의 생성항을 포함하여 자세히 기술하면 지배방정식은 다음과 같이 나타낼 수 있다.

고체상 (Solid phase)

Energy :

$$\frac{\partial((1-\epsilon)h_s)}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \left((1-\epsilon)k_s \frac{\partial T_s}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left((1-\epsilon)k_s \frac{\partial T_s}{\partial y} \right) + q_{rad} + h_{conv} A_s (T_g - T_s) - \left(\sum_{r_s} \dot{M}_{s,r_s} \right) C_p T_s$$

Component :

$$\frac{\partial(\rho_s(1-\epsilon)m_{s,k})}{\partial t} = \sum_{r_s} \dot{M}_{s,k,r_s}$$

기체상 (Gas phase)

Mass :

$$\frac{\partial\rho_g\epsilon}{\partial t} + \frac{\partial\rho_g u_g}{\partial x} + \frac{\partial\rho_g v_g}{\partial y} = - \sum_{r_s} \dot{M}_{s,r_s}$$

x-momentum :

$$\frac{\partial\rho_g\epsilon u_g}{\partial t} + \frac{\partial\rho_g u_g u_g}{\partial x} + \frac{\partial\rho_g v_g u_g}{\partial y} = -\epsilon \frac{\partial P}{\partial x} + \frac{\partial}{\partial x} (\epsilon\mu_g \frac{\partial u_g}{\partial x}) + \frac{\partial}{\partial y} (\epsilon\mu_g \frac{\partial u_g}{\partial y}) + S_x$$

y-momentum :

$$\frac{\partial\rho_g\epsilon v_g}{\partial t} + \frac{\partial\rho_g u_g v_g}{\partial x} + \frac{\partial\rho_g v_g v_g}{\partial y} = -\epsilon \frac{\partial P}{\partial y} + \frac{\partial}{\partial x} (\epsilon\mu_g \frac{\partial v_g}{\partial x}) + \frac{\partial}{\partial y} (\epsilon\mu_g \frac{\partial v_g}{\partial y}) + S_y$$

where, $S_i = \frac{\mu}{\alpha} v_i + C_2 \frac{1}{2} \rho |v_i| v_i$

$$\alpha = \frac{D_p^2}{100} \frac{\epsilon^3}{(1-\epsilon)^2}, \quad C_2 = \frac{3.5(1-\epsilon)}{D_p \epsilon^3}$$

Energy :

$$\frac{\partial\epsilon h_g}{\partial t} + \frac{\partial u_g h_g}{\partial x} + \frac{\partial v_g h_g}{\partial y} = \frac{\partial}{\partial x} (\epsilon k_g \frac{\partial T_g}{\partial x}) + \frac{\partial}{\partial y} (\epsilon k_g \frac{\partial T_g}{\partial y}) + h_{conv} (T_s - T_g) + \left(\sum_{r_s} \dot{M}_{s,r_s} \right) C_p T_s$$

Chemical species :

$$\frac{\partial\rho_g\epsilon m_{g,j}}{\partial t} + \frac{\partial\rho_g u_g m_{g,j}}{\partial x} + \frac{\partial\rho_g v_g m_{g,j}}{\partial y} = M_{s \rightarrow g,j}$$

Equation of state :

$$\rho_g = p / R \sum \frac{m_j T_g}{W_j}$$

2.3 Sub-models

2.2에서 기술한 지배방정식의 생성항에는 반응, 열전달, 내부기공 생성 등에 대한 모델들이 반영된다. 열전달은 전도, 대류, 복사 열전달을 고려해 주게 되고 탈휘발 속도는 다음과 같이 Arrhenius식으로 묘사되고 물질 전달에 의해 제한되는 모델을 사용한다,

$$k_{devol}^{eff} = \left(\frac{1}{k_{Arr}} + \frac{1}{k_m} \right)^{-1}, \text{ where } k_{Arr} = A \exp\left(-\frac{E}{RT}\right)$$

또한 형상변화에 대해서는 입자의 크기 변화나 층의 높이 변화를 무시하고 오직 내부기공의 형성만 생각하고 다음과 같은 지배방정식으로 표현할 수 있다.(4)

$$\frac{\partial f_{v,s,l} \epsilon_{ip,l}}{\partial t} + \frac{\partial v_s \epsilon_{ip,l}}{\partial y} = - \sum_i f_{ip,i} \frac{\dot{M}_{comb,i}}{\rho_i} + \dot{\epsilon}_{ip,loss,l}$$

2.4 계산 방법

각각의 지배 방정식은 유한체적법을 이용하여 이산화하였다. staggered grid를 사용하였고, 유동장을 해석하기 위하여 SIMPLE 알고리즘을 사용하였다. 각 방정식에서의 이산화는 고체상의 경우에는 central-differencing scheme을, 가스상은 upwind scheme을 적용하였다.(5)

Fig.3에 전체적인 계산과정을 나타내었다. 각각의 상에 대해 지배방정식들을 풀고 수렴할 때까지 기체상과 고체상을 번갈아가면서 풀게 된다.

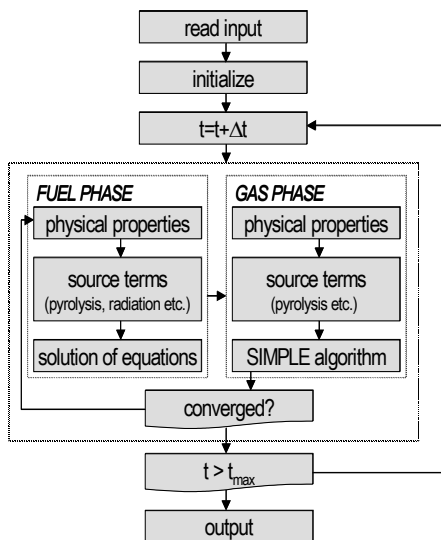


Fig 3. Solving procedure

3. 계산 결과 및 고찰

3.1 계산 조건

Table 1에 장입탄의 조성과 주요 계산 인자들을 나타내었다. 실제 장입탄은 10가지 정도의 원료탄을 배합하여 사용하지만 계산에서는 혼합된 재료의 성상을 가진 균일한 하나의 고체상으로 생각한다. 또한 Table 2에는 COG의 조성을 나타내었다. 계산에서는 COG의 조성을 휘발분의 조성으로 생각하였다.

bed width (m)	0.225	
bed height (m)	6	
t _{max} (sec)	72000	
time step (sec)	20	
Solid material	Size (m)	0.003
	Moisture (%)	7.0
	Volatile (%)	30.4
	Char (%)	56.6
	Ash (%)	5.2
Pyrolysis	Internal porosity	0.4
	A	1.5×10 ⁴
	E(kcal/kmol)	30

Table 1. calculation parameter and composition of coking coal

Component	CO ₂	O ₂	C ₂ H ₄	CO	CH ₄	H ₂	N ₂
Composition(%)	2.84	0.4	2.2	7.87	26.37	57.26	3.04

Table 2. Composition of COG

3.2 실험 결과

Fig.4는 실제 코크스 공장의 코크 오븐에서 베드의 중앙 부분에서 thermocouple과 probe를 이용하여 온도와 내부 가스 압력을 측정한 결과이다. 약 100℃에서 수분증발이 일어나면서 온도가 일정하게 유지되고 8시간 정도가 지나면서 수분증발이 끝나고 그 이후에는 계속 온도가 상승한다. 내부 압력은 약 500℃에서 최대가 되는 것을 관찰할 수 있다. 코크스 공정에서 오븐벽에 평행한 두개의 연화층(plastic layer)가 형성되어 있고, 이 연화층은 투과성이 상당히 낮아서 가스의 방출을 방해하게 된다. 그러므로 내부의 가스 압력은 이 연화층에 크게 영향을 받는다. 이 두개의 연화층은 탄화 과정이 진행됨에 따라 오븐의 중앙으로 이동하게 되고 이 두 연화층이 오븐의 중앙에서 만나는 시점에 내부가스압력이 최대가 된다.(6).

3.3 계산 결과

Fig.5에서는 코크스 공정이 4시간 진행되었을 때 오븐내에서의 온도분포를 나타내었다. 오븐내의 온도가 상당히 상승하여 이미 boiling front가 오븐의 중앙으로 많이 이동한 것을 관찰할 수 있다. 오븐의 폭에 비해 높이가 훨씬 크기 때문에 높이 방향으로의 변화는 거의 없는 것을 관찰할 수 있다. Fig.6에서는 폭방향으로 3곳의 온도를 시간에 따라 나타낸 결과이다. 중심에서의 온도 분포만을 봤을 때는 앞의 3.2에서의 실험 결과와 유사한 경향을 보이는 것을 볼 수 있다. 모델의 검증은 위해서는 중심부 뿐만이 아니라 다른 지점이나 조건에 대한 더 많은 실험자료가 필요함

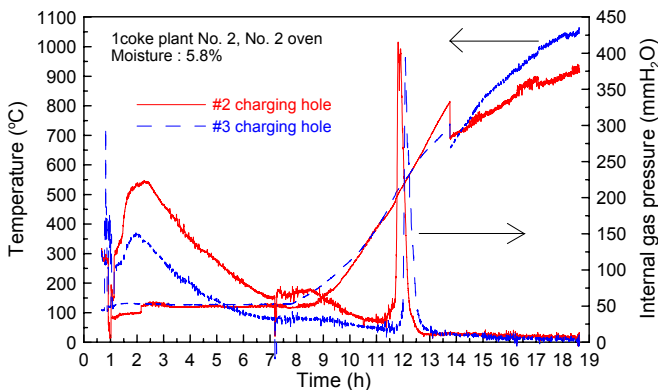


Fig 4. Temperature and Internal gas pressure profile with time within Coke oven center

을 알 수 있다.

4. 결 론

본 연구에서는 코크오븐 내에서의 코크스 공정을 모사할 수 있는 2차원 모델을 제시하여 계산된 결과를 나타내었다. 또한 실제 코크스 공장에서 측정된 실험값과 비교하여 모델에 대한 검증을 하였다. 계산 결과는 주로 온도값에 대한 것으로 계산된 결과는 대체로 물리적인 현상을 잘 예측하고 있다. 현재의 모델링은 코크스 공정에서의 coking coal의 복잡한 물성 변화를 고려하지 않았기 때문에 가스의 유동이나 내부 가스압력과 같은 중요한 운전상황에 대해서는 타당한 결과를 얻을 수 있는 단점이 있으며 이것은 향후 연구에서 보완되어야 할 사항이다.

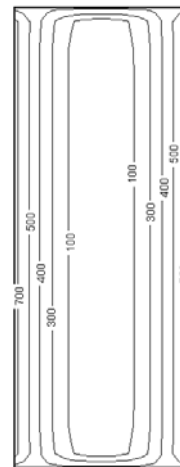


Fig 5. Temperature distribution in a coke oven (t=4h)

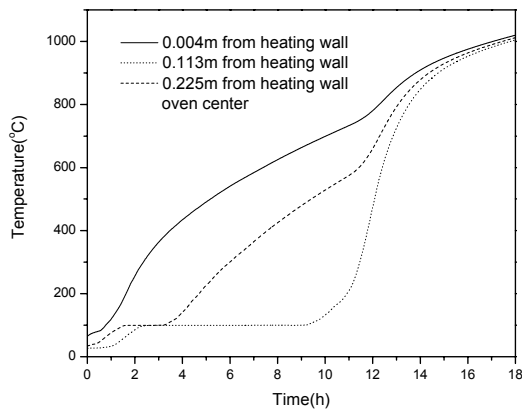


Fig 6. Simulated Temperature profile within the coke oven

참고문헌

- (1) E.J. Osinski, P.V. Barr, and J.K. Brimacombe, 1993, "Mathematical model for tall coke oven battery Part 1", Ironmaking and Steelmaking, Vol. 20, , pp. 350-359.
- (2) P.V. Barr, E.J. Osinski, J.K. Brimacombe, and M.A. Khan, 1994, "Mathematical model for tall coke oven battery Part 3", Ironmaking and Steelmaking, Vol. 21, pp. 44-55.
- (3) D.Merrick, 1983, "Mathematical models of the thermal decomposition of coal" Fuel, Vol. 62, 1983, pp.534-539
- (4) Won Yang, Changkook Ryu and Sangmin Choi, 2003, "Combustion modeling of a solid fuel bed with consideration of the mutiple solid phases", 26th KOSCO Symposium Proceeding, pp.119-127
- (5) Suhas V. Patankar, "Numerical Heat Transfer and Fluid Flow"
- (6) Woon-Jae Lee and Yong-kuk Lee, "International Gas Pressure Characteristics Generated during Coal Carbonization in a Coke Oven", Energy & Fuel, Vol. 15, 2001, pp.618-623