

입자크기에 따른 석탄 가스화기내의 반응성 유동장 모사

조석연, 서경원

아주대학교 화학·생물공학부

요 약

본 연구에서는 Alaska Usibelli 아역청탄이 사용되는 실린더형 석탄 가스화기내에서 석탄의 입자크기가 반응성 유동장과 주요 생성물의 농도분포에 미치는 영향을 고찰하기 위하여 미분탄 입자의 크기를 $40\mu\text{m}$, $60\mu\text{m}$, $100\mu\text{m}$, $120\mu\text{m}$ 및 $140\mu\text{m}$ 로 각각 나누어 전산모사를 수행하였다. 모사결과, 가스화기 내에서 석탄의 입자크기가 가스화 생성물의 농도와 유동장에 커다란 영향을 미침을 알 수 있었다. 입자의 크기가 $100\mu\text{m}$ 일 때 가스화기 출구에서 주 생성물인 CO와 H₂가 최대로 생성되고 이때 이들의 평균 몰분율은 각각 0.62, 0.16(dry basis, inert free)으로 예측되었다.

1. 서 론

본 연구에서는 93-PCGC-2[1]을 이용하여 특정 미분탄에 대한 가스화 반응을 해석하였으며, 이 93-PCGC-2는 미국 BYU(Brigham Young University)의 ACERC (Advanced Combustion Engineering Research Center)에서 1993년에 발표한 코드로서 기존의 PCGC2[2]을 향상시킨 프로그램이다. 즉, 석탄의 팽윤, 최악의 반응성, 석탄의 탈휘발화, thermal NO_x 반응 등의 부모모델과 층류영역과 전이영역이 추가되었고, 에너지 방정식이 보강되었으며 1차 흐름이상의 주입구에서 고체를 주입할 수 있도록 수정되었다.

2. 수치모델 및 모사

본 연구에서 사용된 수치모델은 미분탄 연소, 가스화 및 여러 기-고, 기-기 반응성 흐름 및 비반응성 흐름의 2차원 정상상태 모델을 기본으로 하며, 기상에 대해서는 Eulerian계 해석법 그리고 입자상에 대해서는 Eulerian계와 Lagrangian계의 혼합 해석법을 모델화하여 난류성 화염내의 난류 유체역학과 난류 연소과정을 강조하였다. 이러한 기체-입자에 대한 Eulerian계 기상의 보존방정식들은 참고문

현[3]에 잘 정리되어있다. 대부분의 기상반응은 혼합정도에 의해 제한되어진다고 가정하였기 때문에 기상의 연소는 혼합분율을 근거로 하는 통계적 확률밀도 함수로 모델화하였다. 기상에 대해서는 $(\kappa - \varepsilon)$ 의 두 난류에 관한 식들을 사용하였으며, 입자상은 공기역학적 입자 항력과 난류성 입자분산의 영향을 포함하고 있다. 이런 입자들의 반응은 기상의 난류시간 크기에 비해 느린 것으로 고려하였다. 석탄의 탈휘발화, 촉의 반응에 대한 속도는 시간 평균인 기체 물성들을 근거로 고려하였다. 비등방성이고 다중 산란인 입자와 기체의 복사열도 포함하였다[1].

공정의 모사를 위한 수치해석에는 기본 편미분방정식을 유한차분적분법으로 바꿔서 해를 구하는 TEACH CODE[4]와 압력장 계산을 위한 SIMPLER 알고리즘[5] 및 미세입자계와 기상계를 연결하기 위하여 PSI-Cell법[6]을 도입하였다. 이런 수치 해석법을 이용하여 원하는 해를 얻기 위한 알고리즘은 Fig.1에 도시한 바와 같다. 그림에서 볼 수 있는 것과 같이 기상계 변수들의 해를 구한 후에 이들을 이용하여 미세입자계의 변수를 구하며, 새로 구한 미세입자계의 변수들을 이용하여 기상계의 변수를 보정하는 알고리즘이다.

본 연구에서는 Fig.2에서 나타난 것과 동일한 외형을 갖는 계를 반경방향과 축방향으로 37×100 의 격자로 나누어 수치해석을 실행하였다. 이러한 제어체적(control volume)에 대한 2차 편미분 지배방정식을 유한차분법을 이용하여 선형의 유한 차분방정식을 유도하였으며, line-by-line TDMA (Tri-diagonal matrix algorithm)을 이용하여 이것의 해를 구하였다.

3. 모사 결과 및 토론

3-1. 모사조건

모사를 위한 반응기의 크기, 각 흐름의 유속, 기체·고체입자의 물리적 성질과 기체·고체의 유입비율 등의 모사조건을 Table 2에 제시하였다. 모사대상인 미분탄은 Alaska Usibelli 아역청탄(원소분석 C:66.18%, H:4.97%, O:15.81%, N:0.54%, S:0.27%, Cl:0.04%, Ash:12.19%)이며[7], 이 미분탄은 1차 주입구 흐름을 통해 아르곤 기체와 함께 주입되는데 이때 미분탄의 주입 선속도는 유체와 동일한 선속도로 유입되는 것으로 가정하였다. 그리고 2차 주입구 흐름에서는 산화제인 산소가 주입되었고, 흡착제는 황화합물을 흡착시키기 위해 측면벽을 통해서 3차 주입구 흐름으로 주입되었다. 미분탄 입자의 크기가 $40 \mu\text{m}$, $60 \mu\text{m}$, $100 \mu\text{m}$, $120 \mu\text{m}$, 및 $140 \mu\text{m}$ 인 경우에 대해서 각각 전산모사를 실시하였다.

3.2 석탄입자크기에 따른 석탄 가스화의 영향

Fig.3는 Usibelli 아역청탄의 입자크기를 변화시켜 얻어진 생성가스의 예측된 조성 그림이다. 석탄의 입자크기에 따른 H₂와 CO의 평균 몰분율은 석탄의 입자크기가 100 μm일 때 최대로 예측되었으나, CH₄의 평균 몰분율은 입자크기에 큰 영향을 받지 않는 것으로 예측되었다. Fig.4에 도시된 그림은 Usibelli 아역청탄 입자크기에 따른 유동장 결과이다. 입자크기의 변화에 따른 유동장 특성을 속도 벡터와 유선으로 각각 도시하였다. 주입구와 측면벽에 생성된 재순환 영역은 주입구에서의 화염불꽃을 안정화시켜 준다. 이러한 재순환 영역은 석탄입자의 크기가 커질수록 주입벽과 측면벽 사이내에서 점차 확대되어짐을 예측하였다.

4. 결론

Alaska Usibelli 아역청탄이 사용되는 실린더형 석탄 가스화기내에서 석탄의 입자크기가 반응성 유동장과 주요 생성물의 농도분포에 미치는 영향을 고찰하기 위하여 미분탄 입자의 크기를 40 μm, 60 μm, 100 μm, 120 μm 및 140 μm로 각각 나누어 전산모사를 수행하였다. 해석결과, 가스화기내 주입구의 화염불꽃을 안정화시키는 재순환 영역은 석탄입자의 크기가 커질수록 주입벽과 측면벽 사이내에서 점차 확대됨을 알 수 있었다. 또한 석탄의 입자크기가 100 μm일 때 출구에서 주요 가스화 생성물인 H₂와 CO가 최대로 생성되는 것으로 예측하였다. 이 경우 H₂, CO, CO₂ 및 CH₄의 가스화기 출구에서의 평균 몰분율은 각각 0.158, 0.621, 0.221, 0.001이었다.

참 고 문 헌

1. Smoot, L.D. and Smith, P.J.: "User's Manual for a Computer Program for 2-Dimensional Pulverized Coal Gasification and Combustion Model (93-PCGC-2)", Combustion Laboratory, Brigham Young University (1993).
2. Smoot, L.D. and Smith, P.J.: "User's Manual for a Computer Program for 2-Dimensional Pulverized Coal Gasification and Combustion Model (PCGC-2)", Combustion Laboratory, Brigham Young University (1983).
3. Smoot, L.D. and Smith, P.J.: "Coal Combustion and Gasification", Plenum Press, New York (1985).
4. Gosman, A.D. and Pun, W.M.: "Lecture Notes for Course Entitled",

Calculation of Recirculating Flow", Imperial College, London (1973).

5. Patankar, S.V.: "Numerical Heat Transfer and Fluid Flow", McGraw-Hill, New York (1980).
6. Crowe, C.T., Sharma, M.P. and Stock, D.E.: Trans. ASME, J. Fluids Eng., **99**, 325 (1977).
7. 석탄가스화 복합사이클 발전시스템 실용화 개발(II) 년차 보고서, 상공자원부 (1994).

Table 1. Input parameters for coal gasification.

feed rates	primary gas(kg/h)		4.0
	secondary gas(kg/h)		15.3
	tertiary(sidewall) gas(kg/h)		4.7
	coal in primary(kg/h)		16.0
	sorbent in tertiary(kg/h)		48.0
inlet gas properties	primary	swirl number	0.0
		turbulent intensity	0.1
		temperature(K)	356.0
		mole fractions(Ar)	1.0
	secondary	swirl number	0.0
		turbulent intensity	0.1
		temperature(K)	589.0
		mole fraction(O ₂)	1.0
	tertiary	swirl number	16.0
		turbulent intensity	0.1
		temperature(K)	356.0
		mole fraction(Ar)	1.0
coal particle parameters	particle solid density(kg/m ³)		1,340.0
	initial analysis	raw coal	0.941
		ash	0.059
	elemental analysis(daf)	C	0.754
		H	0.0566
		O	0.1801
		N	0.0062
	S	0.0031	
sorbent particle parameters	particle solid density(kg/ m ³)		1,793.0
	BET surface area(sq m/g)		1.0E+05
geometry	primary tube diameter(m)		0.013
	secondary tube diameter(m)		0.029
	chamber diameter(m)		0.2
	chamber length(m)		2.0
reactor parameters	reactor outlet pressure(N/m ²)		1.84E+05
	side wall temperature		1100.0
computational grid			37 × 100

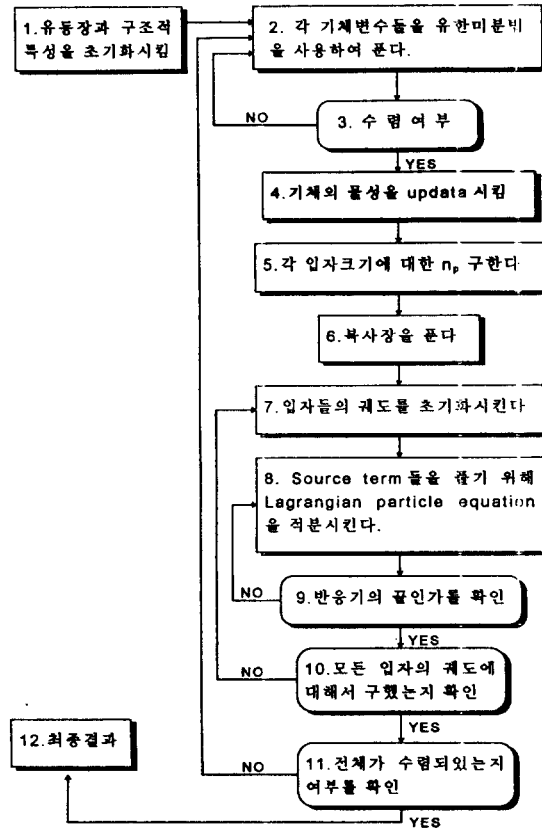


Fig.1. Information flow for simulation.

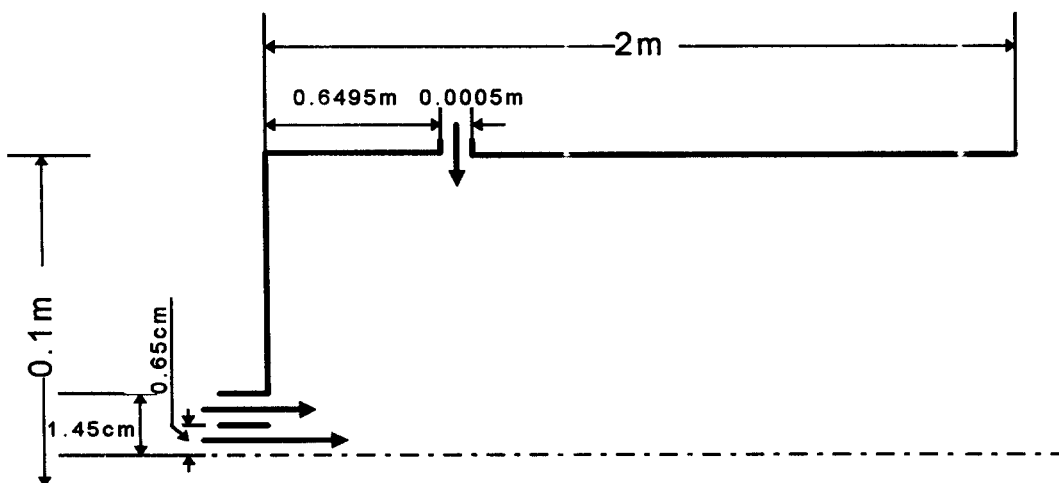


Fig.2. Schematic diagram of a coal gasifier.

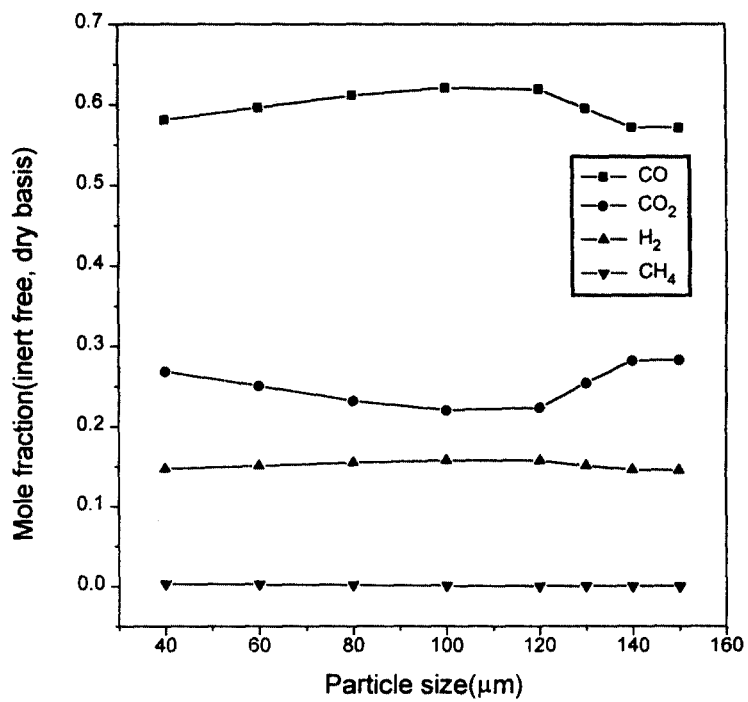
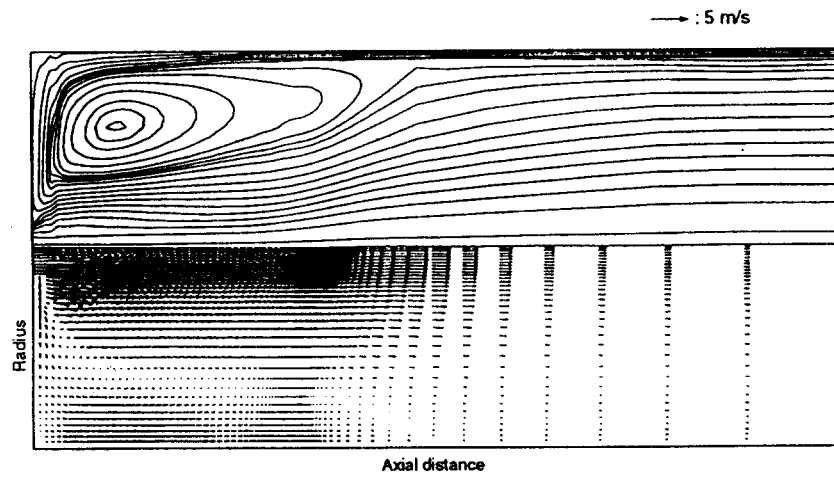
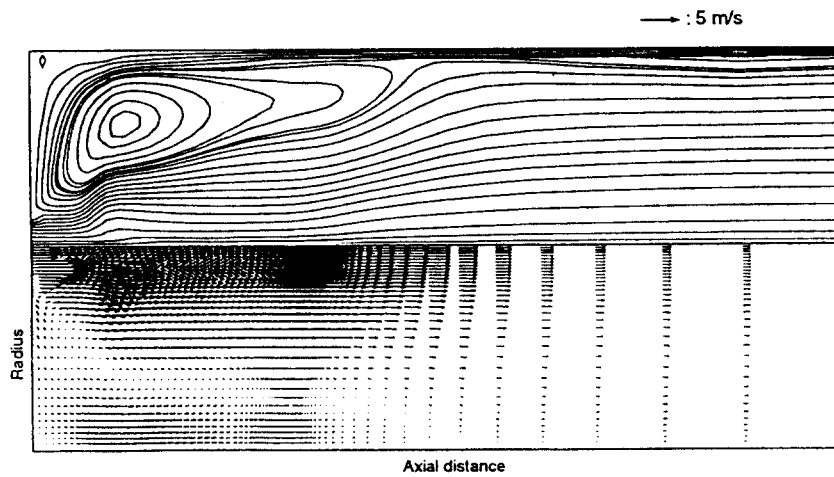


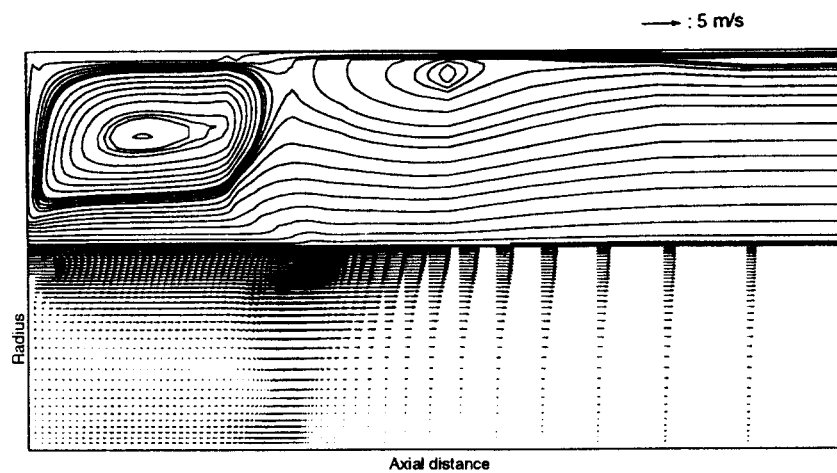
Fig.3. Predicted effects of coal particle size on product gas composition.



(a) simulation 1 (initial diameter of coal particle : $40 \mu\text{m}$)



(b) simulation 2 (initial diameter of coal particle : $80 \mu\text{m}$)



(c) simulation 3 (initial diameter of coal particle : $120 \mu\text{m}$)

Fig.4. Gas phase velocity filed and stream line in a cylindrical gasifier, Usibelli subbituminous.