

## 석탄입자 크기가 가스화에 미치는 영향

조석연 · 서경원

아주대학교 화학 · 생물공학부

### The Effect of the Size of Coal Particles on Gasification Reactions

Seok Yeon Cho and Kyung Won Seo

School of Chemical Engineering and Biotechnology, Ajou University

#### 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, 가스화기내에서 석탄의 입자크기가 가스화 생성물의 농도분포에 커다란 영향을 미침을 알 수 있었다. 입자의 크기가 100  $\mu\text{m}$ 일 때 가스화기 출구에서 주 생성물인 CO와 H<sub>2</sub>가 최대로 생성되고 이때 이들의 평균 몰분율은 각각 0.62, 0.16(dry basis, inert free)으로 예측되었다. 또한 냉가스 효율도 입자크기가 100  $\mu\text{m}$ 일 때 최고치 83%로 예측되었다.

**Abstract**— In this study, numerical computations were performed to scrutinize the effect of the size of coal particles on reactive flow fields and concentration distribution of product gases for five cases with four different particle sizes (40  $\mu\text{m}$ , 60  $\mu\text{m}$ , 100  $\mu\text{m}$ , 120  $\mu\text{m}$ , 140  $\mu\text{m}$ ) in an axisymmetric cylindrical coal gasifier in which Alaska Usibelli subbituminous coals were gasified. Predictions showed that coal particle size affected the concentration distribution of product gases. When coals of 100  $\mu\text{m}$  were gasified, the maximum average concentrations of major products, H<sub>2</sub> and CO, were predicted at the exit of the gasifier. The average mole fractions of CO and H<sub>2</sub> were shown to be 0.62, and 0.16 (dry basis, inert free), respectively. The cold gas efficiency of 83% was also predicted for the same particle size of 100  $\mu\text{m}$ .

#### 1. 서 론

석탄자원을 유효하게 이용하는 방법중에 하나로 석탄 가스화를 들 수 있다. 고체인 석탄에 산소나 H<sub>2</sub>O를 반응시켜 기체로 전환함으로써 수송, 저장 등 취급상의 문제를 해결하고, 탈황·탈진처리를 하면 폭넓게 이용될 수 있는 청정 에너지(clean energy)를 얻게 된다. 이러한 석탄 가스화 시스템중 가장 현실성있는 방법중의 하나가 석탄 가스화 복합발전(Integrated Gasification Combined Cycle; IGCC)으로 미국, 독일, 네델란드를 비롯한 세계 각국에서 높은 관심을 가지고 있으며 여러 선진국에서는 파일럿 플랜트를 갖추어 연구 및 개발에 많은 노력을 기울이고 있다. 석탄의 가스화로부터 얻는 가스

는 90% 이상의 메탄가스를 포함한 고열량 가스화(CO+H<sub>2</sub>)의 혼합가스를 포함한 중·저열량 가스로 나뉠 수 있으며, 보통 고열량 기체는 대체 천연가스로, 중열량 가스는 연료가스나 합성원료 또는 액화공정의 수소 원료로, 저열량 가스는 수증기 생산과 전기 발전용으로 활용된다<sup>1)</sup>. 비발동반 가스화기로 가동중인 대표적 공정들의 조업특성과 생성가스의 조성은 Table 1에 보인 바와 같다.

석탄 가스화 시스템중 가장 핵심되는 부분은 석탄 가스화기이며 이 가스화기의 설계 및 최적 운전조건을 제시하기 위해서는 가스화기내 반응성 유동장을 해석할 필요가 있다. 그러나 석탄 자체의 복잡한 성장만큼이나 가스화기 내에서 석탄의 거동과 물리·화학적 메카니즘

**Table 1. The operating characteristics and the product gas of coal gasification on gasifying bituminous coal in commercial entrained gasifiers<sup>3,14)</sup>.**

Commercial Processes	Koppers-Totzek	Texaco*	Foster Wheeler	Combustion Engineering
operating characteristics				
feed gas (liquid)	steam/oxygen	water/oxygen	steam/air	air
pressure (MPa)	0.13	4.0	2.5	0.1
temperature (K)	1925	~1400	1370~1540	1750
steam/oxidizing gas (kg/kg)	0.4	0.5	0.05	0.0
residence time (s)	~1	~3	-	2.5
cold gas efficiency (%)	75	~75	90	69
composition of product gas (mole %)**				
CO	53	52	29	23
CO <sub>2</sub>	10	12	3	5
H <sub>2</sub>	36	35	15	12
etc	1	1	53 (includ 49% N <sub>2</sub> )	60 (includ 59% N <sub>2</sub> )

\*슬러리로 공급하는 경우.

\*\*가스정제 및 냉각후의 건조가스 기준.

은 매우 복잡하다. 또한 미분탄의 연소 또는 가스화의 해석을 위해서는 기체·고체상의 유체역학, 화학반응, 복사 열전달을 함께 고려하여야 하므로 매우 복잡한 모델이 요구된다. 그럼에도 불구하고 대표적으로 알려진 미분탄 연소와 가스화의 전산모사를 위한 연구의 결과로서 미국 Brigham Young University(PCGC-2)와 Imperial College에서 각각 개발한 프로그램을 주된 예로 들 수 있으며, 그외의 많은 연구자들이 미분탄에 대한 연소 또는 가스화에 대한 해석용 프로그램을 개발하였다<sup>24)</sup>.

본 연구에서는 93-PCGC-2<sup>25)</sup>을 이용하여 특정 미분탄에 대한 가스화 반응을 해석하였으며, 이 해석을 위해 2차원 기상 및 입자상의 유동장에 관한 수학적 모델 및 모사대상인 가스화기에 대해 적절한 가정을 설정하여 가스화기의 내부현상을 모사하였다. 특히 모사를 통하여 공정변수들이 석탄 가스화 특성에 미치는 영향을 알아보기 위해 공정변수들중 석탄 입자크기를 택하여 석탄 입자크기가 석탄 가스화 특성에 미치는 영향을 조사하였다.

## 2. 수치모델 및 모사

### 2-1. 수치모델 및 모사<sup>26)</sup>

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 해석하였다. 대부분의 기상반응은 혼합정도에 의해 제한된다고 가정하였기 때문에 기상의 연소는 혼합분율을 근거로 하는 통계적 확률밀도 함수로 모델화되었다. 기상에 대해서는 ( $\kappa$ - $\epsilon$ )의 두 난류에 관한 식들이 사용되었으며, 입자상은 공기 역학적 입자 항력과 난류성 입자분산의 영향을 포함하고 있다. 이런 입자들의 반응은 기상의 난류시간 크기에 비해 느린 것으로 고려되었으며 석탄의 탈휘발화, 화의 반응에 대한 속도는 시간 평균인 기체 물성들을 근거로 고려되었다. 또한 비등방성이고 다중 산란인 입자와 기체의 복사 열전달도 포함되었다. 이러한 기상과 입자계의 지배방정식, 석탄의 반응모델, 복사 열전달 모델 등은 Smoot 등<sup>26)</sup>의 자료에 기술되었다.

공정의 모사를 위한 수치해석에는 기본 편미분방정식을 유한차분적분법으로 바꿔서 해를 구하는 TEACH CODE<sup>26)</sup>와 압력장 계산을 위한 SIMPLER(Semi-Implicit Method for Pressure-Linked Equations, Revised) 알고리즘<sup>27)</sup> 및 미세입자계와 기상계를 연결하기 위하여 PSI-Cell(Particle Source-In-Cell)법<sup>28)</sup>을 도입되었다. 이런 수치 해석법을 이용하여 원하는 해를 얻기 위한 알고리즘은 Fig. 1에 도시하였으며 그 절차는 다음과 같다.

1) 처음 Eulerian 기상 영역에 대한 변수들의 해는 입

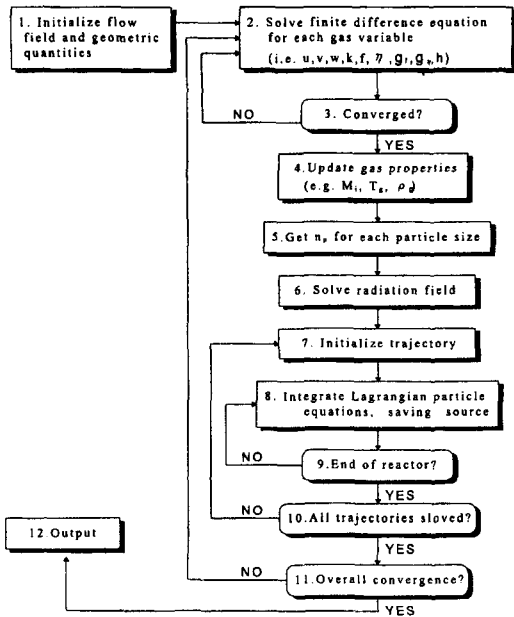


Fig. 1. Information flow for simulation<sup>7)</sup>.

자들을 고려하지 않고 SIMPLE 또는 SIMPLER 알고리즘을 통하여 계산된다.

- 2) 플럭스 방법(Flux method)으로 복사장을 계산하다.
- 3) Lagrangian 입자상 영역의 대표되는 입자계도들을 고려하여 입자의 생성항(source term)영역을 계산한다.
- 4) 다시 갱신된 생성항 영역을 가지고 기상 영역에 대한 변수들을 계산한다.
- 5) 단계 2의 복사장을 다시 계산하며 전체계산이 수렴될 때까지 계산을 반복한다.

단계 2에서부터 단계 4까지는 Fig. 1의 단계 7에서부터 단계 11까지를 의미한다. 전체 수렴은 단계 2~4의 입자 반복계산(particle iteration)이 여러번 수행되는 과정에서 기상의 변수들이 현저하게 변화되지 않을 때 기대된다. 유한차분식을 통한 수렴기준은 다음과 같다<sup>9)</sup>.

$$\sum_i \frac{A_i}{A_i - S_p} < 1 \text{ for all } i$$

$$\sum_i \frac{A_i}{A_i - S_p} < 1 \text{ for at least one } i$$

d는 방향(N,S,E,W), i는 면적 인덱스(index), A는 총괄 계수(total coefficient(convection plus diffusion), S<sub>p</sub>는 종속변수 포함하는 생성항이다. 본 연구에서 효율적인 해석을 위하여 수치모델 정의시 기상과 입자상에 대한 가정은 Smoot 등<sup>8)</sup>의 자료에 제시되었다. 본 연구에서는 Fig. 2에서 나타낸 것과 동일한 외형을 갖는 계를 반경 방향과 축방향으로 37×100의 격자로 나누어 수치해석을 실행하였으며, 특히 3차 흐름이 있는 지역에서는 계의 종속변수들의 수치가 급하게 변할 것을 예상하여 격

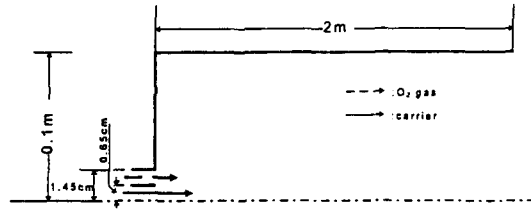
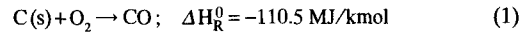


Fig. 2. Schematic diagram of a cylindrical gasifier<sup>7)</sup>.

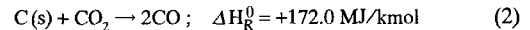
자를 밀집되게 나누었다. 이러한 제어체적(control volume)에 대한 2차 편미분 지배방정식을 유한차분법을 이용하여 선형의 유한 차분방정식을 유도하였으며, line-by-line TDMA(Tri-diagonal matrix algorithm)을 이용하여 해를 구하였다.

### 2-2. 기본적인 석탄 가스화 반응

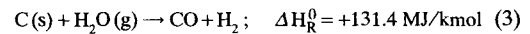
가스화 동안에 본 연구에서 모델화한 주요 총괄반응은 다음과 같다<sup>11)</sup>.



이 반응은 발열반응이다. 더욱이 C(s)와 산소가 반응하여 생성된 CO는 계속해서 기상내에서 자유산소(free oxygen)와 반응하여 CO<sub>2</sub>가 생성된다. 그러므로 연료성이 농후한 계에 있어서 미반응으로 남아있는 C(s)를 더 소모시키기 위해 다음과 같은 매우 느린 흡열반응이 일어나야 한다.



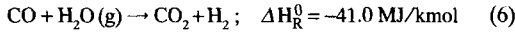
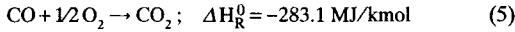
C(s)와 산소의 반응결과에 의해 높게 상승된 기체의 온도를 조절하고 또한 수소의 농도를 증가시켜 생성가스의 발열량을 증가시키기 위해 보통 반응물로 수증기를 첨가한다.



이 반응은 역시 흡열반응이며 흡열에 필요한 에너지 때문에 C(s)와 O<sub>2</sub>의 반응열에 의존해야 한다. 비록 C(s)와 H<sub>2</sub>O 반응속도는 C(s)와 O<sub>2</sub>의 반응속도에 비해 매우 느리지만 생성된 수소에 의해 생성된 기체의 발열량이 증가된다. 석탄 화(C(s))는 CO<sub>2</sub> 또는 수증기와 느린 비균일 반응을 하며 높은 온도에서 이들 반응들은 더 빠르게 진행된다. 그러나 연소내에서 일어나는 산소-화 반응에 비해 느리다. 화의 반응속도는 주어진 온도에서 반응물에 따라 크게 다르다. 일반적인 순서는 다음과 같다.



보통 온도가 1250-1750 K일 때 CO<sub>2</sub>와 황의 반응속도는 3승정도의 크기로 변하며, 산소와 황의 반응속도는 6승 내지 7승정도의 크기이다. 이들 특성은 석탄종에 따라 근본적으로 다르지만 입자표면으로 산소의 확산이 지배적인 높은 온도에서는 석탄 유형별 그리고 산화제 유형별 영향은 감소될 것이다. 또한 석탄/수증기/산소계에서 다음과 같은 기체들의 반응도 중요하다.



이들 반응중 첫 번째 반응에 의해 산소가 빨리 소모되며 기체의 온도가 증가된다. 그리고 이 반응에 의해 느린 비균일 반응인 C(s)와 CO<sub>2</sub>의 반응에 필요한 에너지가 공급된다. 적은 열이 발생하는 두 번째 수증기-기체 변환반응(shift reaction)에 의해 CO로부터 CO<sub>2</sub>가 생성되며 마지막 생성물의 생성분포를 조절하는 경향이 있다. 지금까지의 비균일 반응과 기상반응들에 대한 반응 모델은 Smoot 등<sup>5)</sup>의 자료에 상세히 제시되어 있다.

### 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 건식상태의 Alaska Usibelli 아역청탄(원소분석 C: 75.4%, H: 5.7%, O: 18.0%, N: 0.02%, S: 0.31%)이며<sup>12)</sup>, 이 미분탄은 1차 주입구를 통해 아르곤 기체와 함께 주입되었고 미분탄의 주입 선속도는 유체와 동일한 선속도로 유입되는 것으로 가정하였다. 그리고 2차 주입구로는 산화제인 산소(수증기는 미사용)만 주입되었다. 이 때 1차 주입구를 통해 온도가 356 K인 아르곤과 석탄이 각각 4.0, 16.0 kg/h로 주입되었으며, 2차 주입구로는 산화제인 산소가 온도 586 K, 유량 15.3 kg/h로 주입되었다. 이들 주입구에서의 난류세기는 평균속도에 대한 변동속도 성분의 제곱평균 제곱근의 비로 정의되며 각각 0.1이었다.

#### 3-2. 모사결과 및 토론

본 연구에서는 석탄의 입자크기를 40 μm, 60 μm, 100 μm, 120 μm, 및 140 μm로 변화시키면서 모사를 수행하여 각 입자크기별 주요 생성가스의 농도분포를 비교·검토하였다.

Fig. 3은 석탄의 입자크기에 따른 H<sub>2</sub>의 가스화기내 농도분포를 도시한 결과이다. 가스화가 진행될 때 석탄의 탈휘발화<sup>13)</sup> 또는 석탄과 H<sub>2</sub>O의 반응에 의해 H<sub>2</sub>가 생성되

Table 2. Input parameters for coal gasification<sup>7)</sup>.

Feed rates	Primary gas (kg/h)	4.0	
	Secondary gas (kg/h)	15.3	
	Coal in primary (kg/h)	16.0	
Primary	Swirl number	0.0	
	Turbulent intensity	0.1	
	Temperature (K)	356.0	
Inlet gas properties	Mole fractions (Ar)	1.0	
	Swirl number	0.0	
	Turbulent intensity	0.1	
Secondary	Temperature (K)	589.0	
	Mole fraction (O <sub>2</sub> )	1.0	
Particle solid density (kg/m <sup>3</sup> )		1,340.0	
Initial analysis	Raw coal	0.941	
	Ash	0.059	
Coal particle parameters	C	0.754	
	H	0.0566	
	Elemental analysis (daf)	O	0.1801
		N	0.0062
		S	0.0031
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 <sup>2</sup> )	1.84E+0.5	
	Side wall temperature (K)	1100.0	
Computational grid		37×100	

며 이렇게 생성된 H<sub>2</sub>는 생성가스의 발열량(heating value)을 증가시킨다. 높은 입자 수밀도를 갖는 작은 석탄입자들을 가스화시킨 경우, 가스화기 상단부에서 석탄입자들이 산소와 반응하여 많은 열을 발생시키며, 이때 발생된 열은 석탄과 H<sub>2</sub>O의 흡열반응에 공급되어져 석탄과 H<sub>2</sub>O의 반응을 촉진시키므로 가스화기 상단부에서 H<sub>2</sub>의 농도는 큰 석탄입자를 가스화시킨 경우보다 더 높게 예측되었다. 그러나 가스화기 중간이후 부터는 H<sub>2</sub>의 농도가 낮게 예측되었는데 이는 가스화기 상단부에서 산소와 작은 석탄입자간의 빠른 산화반응으로 인하여 미반응으로 남아있는 석탄이 고갈된 산소대신 H<sub>2</sub>와 반응하여 H<sub>2</sub>를 소모시키기 때문이다. 더욱이 H<sub>2</sub>는 다른

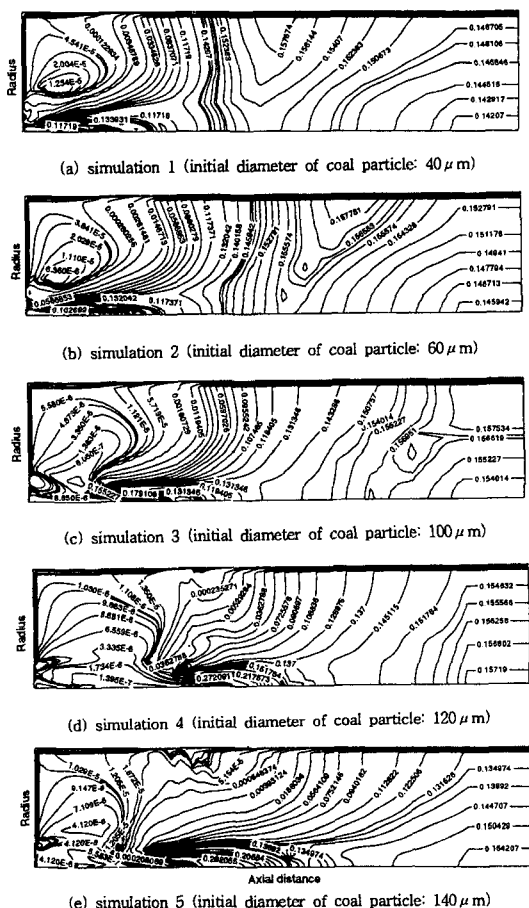


Fig. 3. Predicted contours of H<sub>2</sub> mole fraction in a cylindrical gasifier.

생성가스라도 반응하므로 더 소모된다. 그러므로 하단에서 H<sub>2</sub>의 농도는 커다란 입자를 가스화시킨 경우에 더 높게 예측되었다. 이 때 석탄과 H<sub>2</sub>O의 반응속도는 타 반응속도에 비해 느리므로 반응률은 낮은 편이다.

Fig. 4는 석탄의 입자크기에 따른 CO의 가스화기내 농도분포를 도시한 결과이다. CO는 석탄이 산소와 불완전 연소를 하거나 높은 온도에서 CO<sub>2</sub>가 석탄과 반응할 때 생성된다. 그럼에서 볼 수 있듯이 작은 크기의 석탄입자를 가스화시킨 경우 CO의 농도가 가스화기 상단부에서 더 높았다. 그러나 가스화기 중간이후 부터는 가스화되는 석탄입자가 커질수록 작은 입자를 가스화시킨 경우보다 CO의 농도가 높게 예측되었다. 이는 가스화기 상단부에서 높은 입자 수밀도를 갖는 작은 크기의 석탄입자들이 다량의 산소에 의해 산화되기 때문에 CO의 농도가 높았으나 가스화기 중간이후부터는 더 이상 산소와 석탄입자가 반응하지 않고 오히려 상단에서 생성

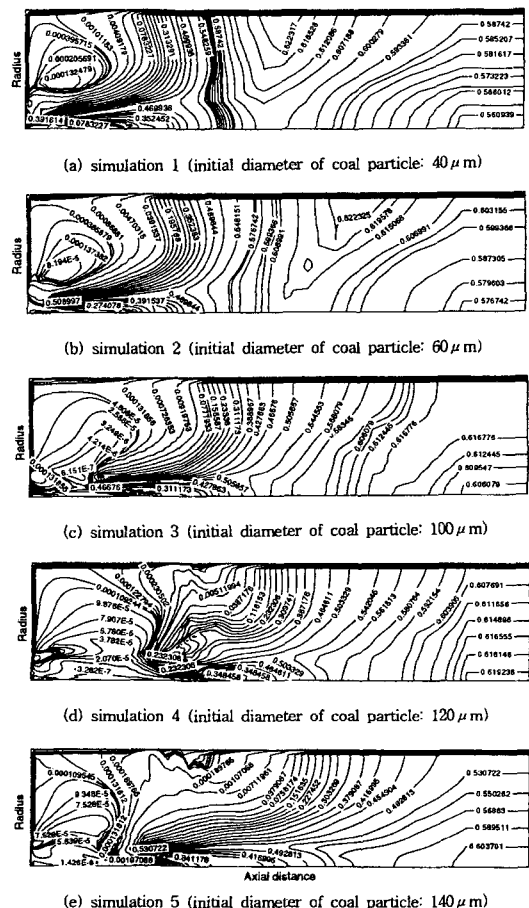


Fig. 4. Predicted contours of CO mole fraction in a cylindrical gasifier.

된 CO가 반응 생성가스 H<sub>2</sub> 또는 연소 생성물인 H<sub>2</sub>O와 반응하여 소모되기 때문에 CO의 농도가 낮았다.

Fig. 5는 석탄의 입자크기에 따른 CH<sub>4</sub>의 농도분포를 도시한 결과이다. CH<sub>4</sub>는 석탄의 탈휘발화, 고온에서 석탄 좌의 수소화 반응 및 CO와 H<sub>2</sub>의 반응으로 생성된다. 그러나 동일한 조건에서 다른 반응물(O<sub>2</sub>, H<sub>2</sub>O, CO<sub>2</sub>)의 반응속도에 비해 메탄화 반응의 속도가 상대적으로 느리기 때문에 생성가스들 중에서 메탄의 농도가 낮게 예측되었다. 40 μm 크기의 작은 석탄입자를 가스화시킨 Fig. 5(a)에 도시한 결과를 보면 더 큰 석탄입자를 가스화시킨 (b), (c), (d), (e)에 도시한 결과보다 하단부에서 CH<sub>4</sub>의 농도가 상대적으로 높게 예측되었다. 이는 가스화기 상단부에서 높은 입자 수밀도를 갖는 작은 석탄입자들과 산소가 반응하여 다량으로 생성된 CO가 가스화기 중반이후 주변에 있는 H<sub>2</sub>와 반응함으로써 큰 입자를 가스화시킨 경우보다 더 많은 CH<sub>4</sub>가 가스화기 하단부

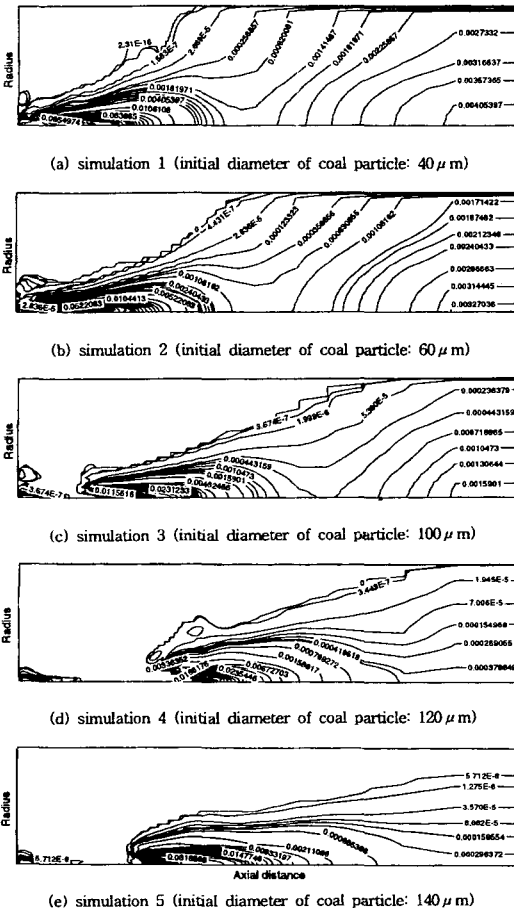


Fig. 5. Predicted contours of CH<sub>4</sub> mole fraction in a cylindrical gasifier.

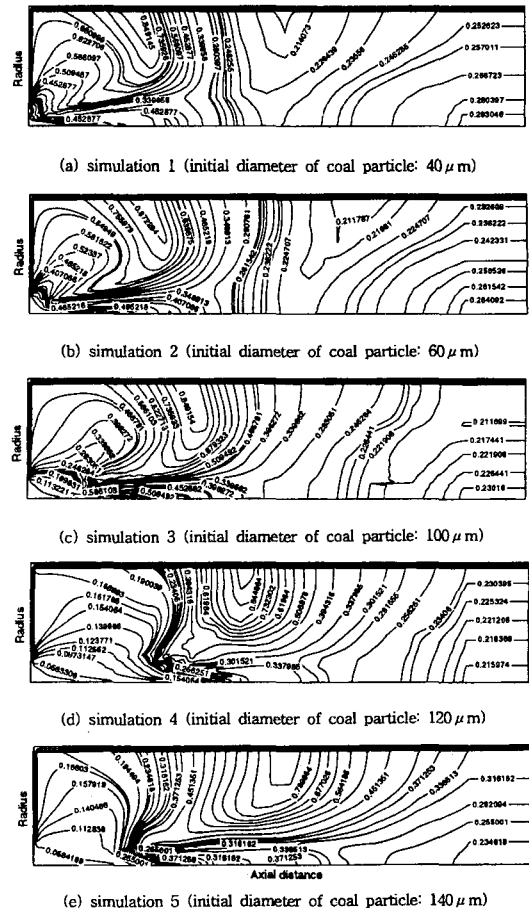


Fig. 6. Predicted contours of CO<sub>2</sub> mole fraction in a cylindrical gasifier.

에서 생성되기 때문이다.

Fig. 6에 도시한 결과는 CO<sub>2</sub>의 가스화기내 농도분포이다. CO<sub>2</sub>는 CO가 O<sub>2</sub> 또는 H<sub>2</sub>O와 반응하여 생성된다. Fig. 6(a)부터 (e)에 도시한 결과에서 볼 수 있듯이 가스화기내에 존재하는 재순환 영역에서는 CO<sub>2</sub>의 농도가 높았다. 이는 유체의 체류시간이 길어져 CO가 CO<sub>2</sub>로 완전 연소되기 때문이다. 또한 석탄의 입자크기에 따른 CO<sub>2</sub>의 농도에 대한 영향을 보면, 가스화시키는 석탄입자가 커질수록 가스화기 상단부에서 CO<sub>2</sub>의 농도는 낮게 예측되었으며 가스화기 하단부에서 CO<sub>2</sub>의 농도는 가스화시키는 석탄입자가 커질수록 CO<sub>2</sub>의 농도가 감소하다가 증가함을 알 수 있었다. 즉 석탄입자가 작을수록 가스화기 상단부에서 산소와 석탄입자가 산화하면서 CO<sub>2</sub>가 많이 생성되어 하단부까지 높은 CO<sub>2</sub>의 농도분포를 보였다. 그러나 가스화시키는 석탄의 입자크기가 100 μm 이상에서는 재순환영역이 측면벽을 따라 가스

화기 중간이후까지 생성되므로 CO<sub>2</sub>의 농도가 다시 증가하였다.

Fig. 7에 도시한 결과는 석탄의 입자크기에 따른 O<sub>2</sub>의 가스화기내 농도분포이다. Fig. 7에 도시한 결과로부터 가스화시킬 석탄입자가 작을수록 가스화기 하단부에서 산소의 농도가 낮음을 알 수 있다. 즉 산소가 높은 입자수밀도를 갖는 작은 석탄입자와 빠르게 반응하면서 고갈되기 때문에 산소의 농도가 하단부로 갈수록 더 낮게 예측되었다.

Fig. 8에는 4 가지 크기(40, 60, 80 및 100 μm)가 균등하게 섞인 석탄을 가스화시켰을 때 생성가스의 가스화기내 농도분포를 보였다. H<sub>2</sub>와 CO의 경우 앞에 언급된 100 μm 단일크기의 석탄을 가스화시켰을 때 보다 가스화기 하단부에서 이들의 농도가 낮게 분포됨을 알 수 있다. 그러나 Fig. 7(c)와 Fig. 8(e)에 도시한 각각의 결과로부터 가스화기내의 산소농도가 Fig. 8(e)에 보인 결과

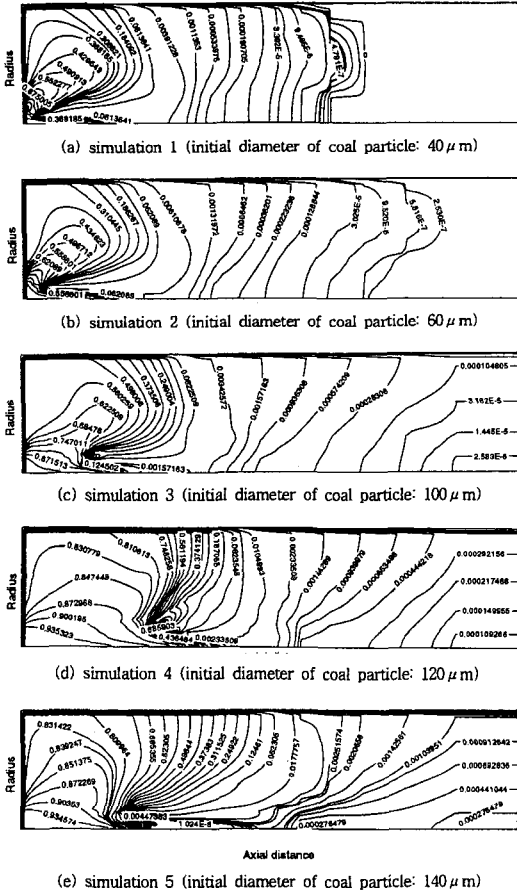


Fig. 7. Predicted contours of O<sub>2</sub> mole fraction in a cylindrical gasifier.

보다 더 높음을 알 수 있다. 즉 4가지 크기로 균등하게 섞인 석탄과 100 μm 단일크기의 석탄을 사용하였을 때 석탄의 전환율은 각각 87%, 83%이었다. 이 결과로부터 4가지 크기로 균등하게 섞인 석탄을 가스화시켰을 경우 석탄 화와 산화반응하는 산소가 가스화기내에서 더 소모되기 때문에 100 μm 단일크기의 석탄을 가스화시켰을 때보다 석탄의 전환율면에서 더 유리함을 알 수 있다. 지금까지 입자크기에 따른 가스화기내 주요 성분들의 농도분포를 검토하였다.

Fig. 9에는 석탄의 입자크기에 따른 이들 주요 성분들의 출구에서 평균 몰분율(inert free, dry basis)을 보였다. 그림에서 볼 수 있듯이 H<sub>2</sub>와 CO의 평균 몰분율은 석탄의 입자크기가 100 μm일 때 최대로 예측되었으며, 이때 H<sub>2</sub>와 CO의 평균 몰분율은 각각 0.158, 0.621이었다. CO<sub>2</sub>에는 석탄입자가 100 μm일 때 평균 몰분율이 0.221로 가장 낮게 예측되었으나, CH<sub>4</sub>의 평균 몰분율은

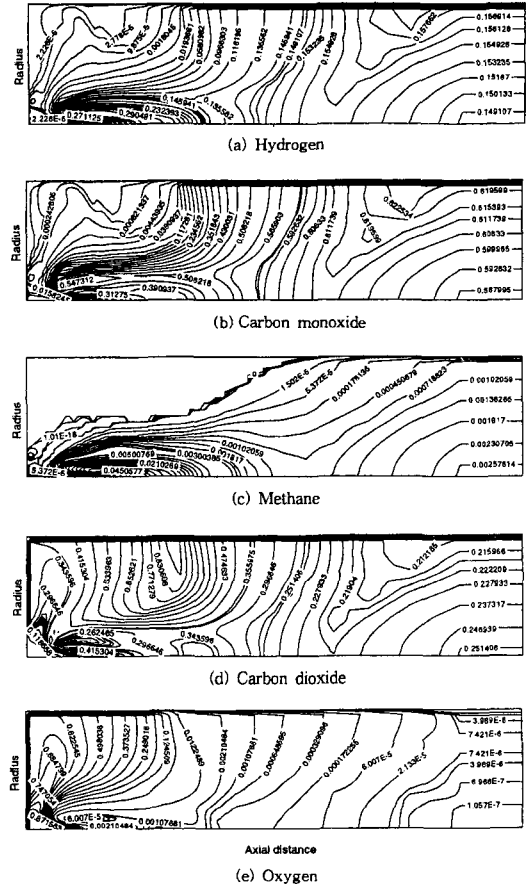


Fig. 8. Predicted contours of mole fractions of gas products in a cylindrical gasifier with the evenly mixed four sizes (40 μm, 60 μm, 80 μm and 100 μm) of particles.

입자크기에 큰 영향을 받지 않는 것으로 예측되었다. 또한 4가지 크기의 입자가 균등하게 섞인 석탄을 가스화시켰을 경우 H<sub>2</sub>, CO, CO<sub>2</sub> 및 CH<sub>4</sub>의 평균 몰분율은 각각 0.154, 0.609, 0.235, 0.002로 예측되었다. 이 때 CO<sub>2</sub>의 평균 몰분율은 Table 1에 제시한 실제 공정에서의 CO<sub>2</sub>의 몰분율보다 높았는데 이는 본 모사의 가스화기 벽면의 온도가 낮아서 석탄 화-CO<sub>2</sub>의 흡열반응이 저하되었으며 또한 산소/석탄의 비를 0.96로 높게 사용하였기 때문에 CO<sub>2</sub>의 농도가 높게 예측되었다고 판단된다.

석탄의 입자크기(8 μm, 20 μm, 40 μm, 63 μm, 126 μm 각각 20 wt%)와 조업조건(Illinois. No.6 Bituminous coal, Primary flow rate 33.2 kg/h, Secondary flow rate 2.4 kg/s, Primary comp. mol. frac. O<sub>2</sub>:0.814, Ar:0.122, H<sub>2</sub>O:0.064, Secondary. comp. mol. frac. H<sub>2</sub>O:1.0)은 다소 다르지만 참고문헌<sup>13)</sup>에는 H<sub>2</sub>, CO, CH<sub>4</sub> 및 CO<sub>2</sub>의 몰분율

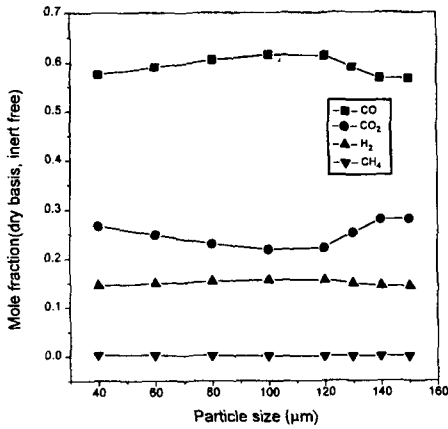


Fig. 9. Effects of particle size on the average concentrations of principal gas products at outlet of a cylindrical gasifier.

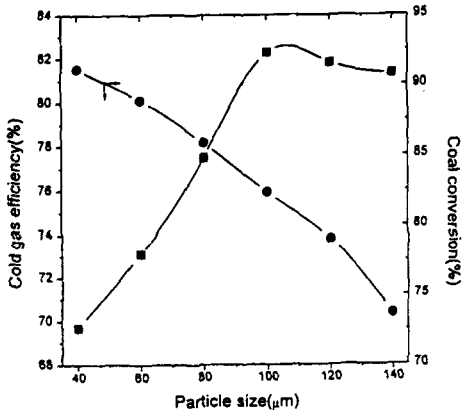


Fig. 10. Effect of particle size on the cold gas efficiency and coal conversion at outlet of a cylindrical gasifier.

(inert free, dry basis)이 각각 0.219, 0.450, 0.007, 0.302로 측정되었다고 보고되어 있다. 이 문헌에서는 2차 주입구 흐름으로 H<sub>2</sub>O가 주입됨으로서 석탄 화와 H<sub>2</sub>O의 반응이 촉진되어 본 연구에서 4가지의 크기가 섞인 석탄을 가스화시켜 예측한 평균 몰분율보다 H<sub>2</sub>의 몰분율이 더 크게 실측된 것으로 생각된다. 또한 석탄의 산화결과 생성된 CO가 주입된 H<sub>2</sub>O와 반응하여 CO<sub>2</sub>를 생성시키므로 CO<sub>2</sub>의 몰분율이 본 연구의 예측치보다 문헌치가 더 높게, CO의 평균 몰분율은 본 연구의 예측치보다 더 낮게 실측된 것으로 판단된다.

Fig. 10은 입자크기에 따른 냉가스 효율(cold gas efficiency)을 도시한 결과이다. 냉가스 효율은 생성된 가스의 실온에서의 발열량 대 석탄(daf)의 발열량 비로 정의된다<sup>1)</sup>. 모사결과 냉가스 효율은 석탄의 입자크기가 100

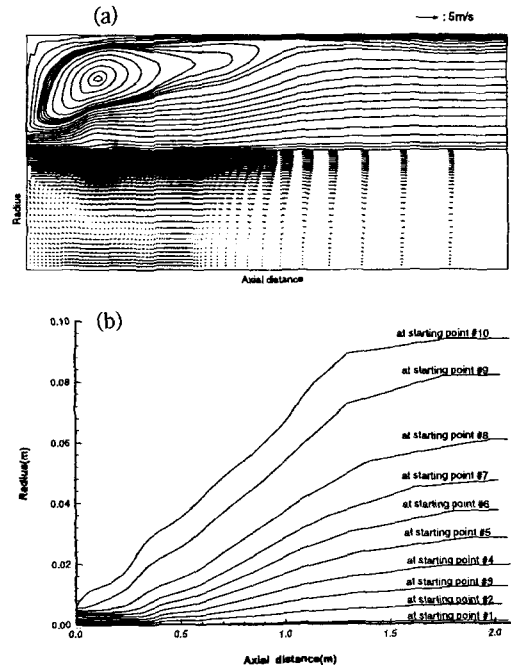


Fig. 11. (a) Gas phase velocity field and stream lines and (b) particle trajectories in a cylindrical gasifier (the particle size is 100 μm).

μm일 때 83%로 다른 입자크기의 석탄을 사용한 경우보다 높게 예측되었다. 또한 4가지 크기의 입자가 균등하게 섞인 석탄을 가스화시켰을 때 냉가스 효율은 76.5%로 예측되었다. 참고문헌<sup>2)</sup>에는 상업적으로 가동중인 가스화기의 냉가스 효율이 70~90%로 보고 되었다.

석탄의 전환율은 석탄의 입자가 작을수록 입자 자체가 더 빠르게 가열되며 또한 산화제와의 접촉이 용이하기 때문에 가스화되기 쉽기 때문에 석탄의 전환율은 입자가 작을수록 높았다.

주요 생성가스의 유출농도가 가장 높았던 100 μm 크기의 석탄입자를 가스화시켰을 때의 유동장 모사결과를 Fig. 11에 도시하였다. Fig. 11(a)는 대칭인 실린더형 가스화기의 중심선을 축으로 상단에는 유선을, 하단에는 속도벡터를 동시에 보인 결과이며, (b)는 10개의 시작점으로부터 각각 출발하는 100 μm의 석탄입자들이 가스화기내를 통과하는 10개의 입자궤도를 도시한 결과이다. (a)에 도시한 결과를 보면 주입벽과 측면벽사이에 커다란 재순환 영역이 주흐름과 분리되어 형성되어 있는 것을 알 수 있으며, (b)에 도시한 결과에서도 주흐름과 동일하게 입자궤도들이 형성되어 있음을 알 수 있다.

Fig. 12은 100 μm의 석탄입자를 가스화시켰을 때 입자 수밀도와 온도분포를 도시한 결과이다. 입자 수밀도



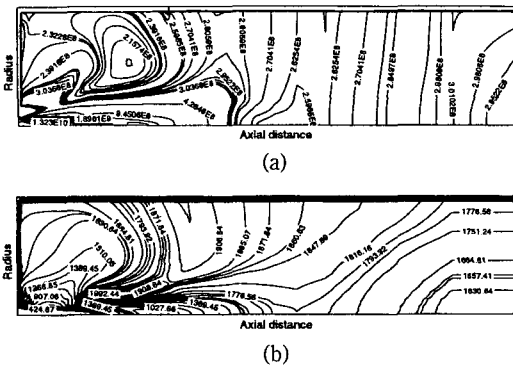


Fig. 12. Predicted contours of (a) particle number densities and (b) gas temperature in a cylindrical gasifier (the particle size is 100  $\mu\text{m}$ ).

를 도시한 (a)를 보면 주입구 근처에서는 석탄입자들이 높은 입자 수밀도로 분포되었지만 가스화기의 다른 곳에서는 그다지 큰 차이없이 골고루 분포되어있음을 알 수 있다. 또한 (b)에 도시한 온도분포에서 볼 수 있듯이 수밀도가 높은 주입구 주변에서 가스의 온도가 더 높았으며 출구에서 생성가스의 온도는 대략 1,700 K였다.

#### 4. 결 론

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. 해석결과, 입자크기에 따라 가스화기내 주요 성분들의 농도분포, 출구 농도, 냉가스 효율에 많은 영향을 주는 것으로 확인되었다. 그 결과를 정리하면 다음과 같다.

1) 작은 석탄입자를 가스화시킨 경우 가스화기 상단부에서 CO와 H<sub>2</sub>의 농도가 높게 예측되었다. 그러나 하단부로 갈수록 산소의 농도가 낮아져 산소에 의한 산화반응은 거의 일어나지 않고 오히려 CO나 H<sub>2</sub>가 석탄 화 또는 주변의 다른 생성가스와 반응함으로써 하단부에서 이들의 몰분율은 큰 석탄입자로 가스화시킨 경우보다 낮게 예측되었다.

2) CH<sub>4</sub>의 농도는 석탄의 입자크기에 큰 영향을 받지 않았으며, 다른 생성가스의 농도보다 매우 낮게 예측되었다.

3) 4가지 크기로 균등하게 섞인 석탄을 가스화시켰을 경우 석탄 화와 산화반응하는 산소가 가스화기내에서 더 소모되기 때문에 100  $\mu\text{m}$  단일크기의 석탄을 가스화

시켰을 때보다 석탄 전환율면에서 더 유리함을 알 수 있다. 이 경우 출구에서 CO, H<sub>2</sub>, CO<sub>2</sub> 및 CH<sub>4</sub>의 평균 몰분율은 각각 0.609, 0.154, 0.302, 0.002로 예측되었으며 이때 냉가스 효율은 76.5%로 예측되었다.

4) 석탄의 입자크기가 100  $\mu\text{m}$ 일 때 출구에서 주요 가스화 생성물인 H<sub>2</sub>와 CO가 최대로 생성되고 냉가스 효율도 최대로 되는 것으로 예측되었다. 이 경우 CO, H<sub>2</sub>, CO<sub>2</sub> 및 CH<sub>4</sub>의 가스화기 출구에서의 평균 몰분율은 각각 0.621, 0.158, 0.221, 0.001이었고 냉가스 효율은 83%이었다.

5) 100  $\mu\text{m}$  크기의 석탄입자를 가스화시켰을 때 주입벽과 측면벽사이에 커다란 재순환 영역이 주흐름과 분리되어 형성되었으나 입자궤도들은 주흐름과 동일하게 형성됨을 알 수 있었다. 또한 석탄의 입자 수밀도는 주입구 근처에서 높은 입자 수밀도로 분포되었지만 가스화기의 다른 곳에서는 그다지 큰 차이 없이 골고루 분포되었다. 또한 수밀도가 높은 주입구 근처에서 가스의 온도가 더 높았으며 출구에서 생성가스의 온도는 대략 1,700 K였다.

#### 감사의 글

본 연구는 '3톤/일급 가스화기 특성화 연구'의 일환으로 고등기술연구원으로부터 지원받아 수행되었습니다. 관계자 여러분께 감사드립니다.

#### 사용기호

- $\kappa$  : kinetic energy of turbulence,  $\text{m}^2/\text{s}^2$
- $\epsilon$  : dissipation rate of turbulence energy,  $\text{m}^2/\text{s}^3$
- $d$  : direction (N,S,E,W)
- $i$  : area indice
- $A_d$  : total coefficient (convection plus diffusion)
- $S_p$  : source term involving the dependent variable implicitly
- $\Delta H_R^\circ$ : change of molar reaction enthalpy in standard state, J/kmol

#### 참고문헌

1. 목영일, 김태문: "21세기의 에너지", 한림원 (1996).
2. 이진욱, 윤용승: "석탄 가스화기내의 기체-고체 이 상유동장에 대한 수치해석 연구", 한국에너지공학 회지, 4(3), 331-337 (1995).
3. 김상돈: "석탄에너지 변환기술", 민음사, pp. 197-259 (1986).

4. 이선경 외: "전산유체역학을 이용한 분류층 석탄가스화기 설계연구", 한국에너지공학회지, **4(1)**, 23-30 (1995).
5. 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).
6. 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).
7. 조석연, 서경원: "석탄 가스화기내의 유동장 특성 연구", 한국에너지공학회지 제출중 (1996).
8. Gosman, A.D. and Pun, W.M.: "Lecture Notes for Course Entitled, Calculation of Recirculating Flow", Imperial College, London (1973).
9. Patankar, S.V.: "Numerical Heat Transfer and Fluid Flow", McGraw-Hill, New York (1980).
10. Crowe, C.T., Sharma, M.P. and Stock, D.E.: *Trans. ASME, J. Fluids Eng.*, **99**, 325 (1977).
11. Smoot, L.D. and Smith, P.J.: "Coal Combustion and Gasification", Plenum Press, New York (1985).
12. 석탄가스화 복합사이클 발전시스템 실용화 개발(II)년차 보고서, 상공자원부 (1994).
13. Brown, B.W., Smoot, L.D., Smith, P.J. and Hedman, P.O.: *AIChE J.*, **34(3)**, 435 (1988).
14. Wen, C.Y. and Stanley Lee, E.: "Coal Conversion Technology", Addison-Wesley Publishing Company, pp. 313-427 (1979).