

석탄 가스화 반응의 동적 거동 전산 모사

지준화[†], 오 민^{**}, 김시문^{*}, 김미영^{*}, 이종원^{*}, 김의식^{*}

*한국전력공사 전력연구원 수화력발전연구소, **한밭대학교 화학공학과

Dynamic Modeling of Gasification Reactions in Entrained Coal Gasifier

JUNHWA CHI^{*†}, MIN OH^{**}, SIMOON KIM^{*}, MIYOUNG KIM^{*}, JOONGWON LEE^{*}, UISIK KIM^{*}

**Power Generation Lab., KEPCO Research Institute, 65 Munji-Ro,
Yuseong-Gu, Daejeon, 305-760, Korea*

***Hanbat National University, Department of Chemical Engineering, San 16-1,
Dukmyung-Dong, Yuseong-Gu, Daejeon, 305-719, Korea*

ABSTRACT

Mathematical models for various steps in coal gasification reactions were developed and applied to investigate the effects of operation parameters on dynamic behavior of gasification process. Chemical reactions considered in these models were pyrolysis, volatile combustion, water shift reaction, steam-methane reformation, and char gasification. Kinetics of heterogeneous reactions between char and gaseous agents was based on Random pore model. Momentum balance and Stokes' law were used to estimate the residence time of solid particles (char) in an up-flow reactor. The effects of operation parameters on syngas composition, reaction temperature, carbon conversion were verified. Parameters considered here for this purpose were O₂-to-coal mass ratio, pressure of reactor, composition of coal, diameter of char particle. On the basis of these parametric studies some quantitative parameter-response relationships were established from both dynamic and steady-state point of view. Without depending on steady state approximation, the present model can describe both transient and long-time limit behavior of the gasification system and accordingly serve as a proto-type dynamic simulator of coal gasification process. Incorporation of heat transfer through heterogenous boundaries, slag formation and steam generation is under progress and additional refinement of mathematical models to reflect the actual design of commercial gasifiers will be made in the near futureK.

KEY WORDS : Coal gasification(석탄 가스화), Gasification model(가스화 모델), Process simulation(공정 모사), Entrained reactor(분류층 반응기)

Nomenclature

[†]Corresponding author : 97102643@kepcoco.kr

[접수일 : 2011.5.23 수정일 : 2011.6.20 게재확정일 : 2011.6.20]

A : surface area of reactor, m²

A^R : frequency factor of reaction R

b : decay factor of char velocity, s^{-1}	v_V : volume flowrate, $m^3 \cdot s^{-1}$
c_{S_i} : specific heat capacity of component S_i , $J \cdot kg^{-1} \cdot K^{-1}$	V : volume of reaction zone, m^3
D : diameter of reactor, m	w_{S_i} : molecular weight of component S_i , $kg \cdot mol^{-1}$
d_s : diameter of char particle, m	w_{E_j} : atomic weight of element E_j , $kg \cdot mol^{-1}$
E^R : activation energy of reaction R , $J \cdot mol^{-1}$	X : carbon conversion of char
$f_{S_i}^U$: molar flowrate of component S_i through unit U , $mol \cdot s^{-1}$	Z : parameter reflecting chemical atmosphere = [CO]/[CO ₂]
$f_{S_i}^{U,in}$: inlet molar flowrate of component S_i through unit U , $mol \cdot s^{-1}$	$\nu_{S_i}^R$: reaction coefficient of component S_i in reaction R
$\Delta f_{S_i}^R$: difference in molar flowrate of component S_i between inlet and outlet of unit R , $mol \cdot s^{-1}$	$\kappa_{S_i}^{E_j}$: number of atom E_j in one molecule of component S_i
g : gravitational constant = $9.8 m \cdot s^{-2}$	ρ_{coal} : density of coal, $kg \cdot m^{-3}$
$g_{S_i}^{in}$: mass flowrate of component S_i into pyrolysis unit, $kg \cdot s^{-1}$	ρ_g : average density of gas phase, $kg \cdot m^{-3}$
g_{coal}^{in} : mass flowrate of coal into pyrolysis unit, $kg \cdot s^{-1}$	ρ_s : density of char particle, $kg \cdot m^{-3}$
h_{S_i} : molar enthalpy of component S_i at the outlet of reactor, $J \cdot mol^{-1}$	ρ_s^{in} : density of char particle at the inlet of reactor, $kg \cdot m^{-3}$
$h_{S_i}^{in}$: molar enthalpy of component at the inlet of reactor, S_i , $J \cdot mol^{-1}$	ρ_s^{out} : density of char particle at the outlet of reactor, $kg \cdot m^{-3}$
ΔH^R : molar heat of reaction R , $J \cdot mol^{-1}$	λ_{ash} : ash content in coal, dry basis
k : constant of char conversion reaction, s^{-1}	λ_{E_j} : content of element E_j in coal, dry basis
k^R : constant of reaction R	λ_{H_2O} : moisture content in coal, wet basis
L : length of reactor, m	$\lambda_{S_i}^{pyro}$: mass ratio of component S_i in pyrolysis product
m_{char} : mass of char, kg	$\lambda_{S_i}^{pyro,s}$: mass ratio of component S_i in pyrolysis product under 1 atm
n^R : order of reaction R	λ_{VM}^{pyro} : mass ratio of volatile matter in pyrolysis product
p : pressure of the reactor, Pa	μ : viscosity of gas, $Pa \cdot s$
p^R : pressure of the gaseous reagent of reaction R , Pa	ϕ : parameter reflecting relative magnitude of partial and full oxidation of char
$[q]$: heat content in unit volume, $J \cdot m^{-3}$	ψ : structure factor of random pore model
R_g : ideal gas constant = $8.314 J \cdot mol^{-1} \cdot K^{-1}$	
r^R : rate of reaction R , $mol \cdot m^{-3} \cdot s^{-1}$	
$[S_i]$: molar concentration of component S_i , $mol \cdot m^{-3}$	
T : temperature of reactor, K	
T_w : temperature of reactor wall, K	
t_r : residence time of char in reactor, s	
u : coefficient of overall heat loss, $J \cdot s^{-1} \cdot m^{-2} \cdot K^{-1}$	
v_g : velocity of gas, $m \cdot s^{-1}$	
v_s : velocity of char particle, $m \cdot s^{-1}$	
v_s^i : inlet velocity of char particle, $m \cdot s^{-1}$	
v_s^t : terminal velocity of char particle, $m \cdot s^{-1}$	

1. 서 론

석탄의 가스화 공정은 주입되는 석탄과 산소의 비율, 석탄 입자의 입경 분포, 석탄의 조성 등 다양한 공정 인자에 의해 영향을 받는 고온, 고압의 공정으로서 가스 및 입자의 유동, 온도 분포, 합성가스의 조성 등 반응기 내부의 물리, 화학적 상태를 정확히 파악하는 것이 어렵다. 이러한 한계를 극복하기 위

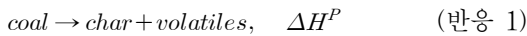
한 방안으로서 현재까지 가스화 공정의 동적 또는 정상상태(steady-state)에서의 거동을 예측하기 위한 많은 전산 모델 기법과 이들을 이용한 모의 계산 결과가 소개되었다. 가장 흔한 예로서는 상용 공정 모사 프로그램인 ASPEN, PROII, HYSYS 등에서 제공하는 Gibbs 반응기 모델을 이용한 정상 상태 모사를 들 수 있다. 또한 상기한 상용 프로그램에 의하지 않고 자체적인 수학적 모델을 기반으로 공정 모사를 수행한 예도 다수 있으나 이러한 경우에도 대부분은 정상 상태 가정에 근거한 PFR 반응기에 국한되었다¹⁻⁵⁾. 그러나 김미영 등이 지적하였듯이 정상상태 모사는 가스화 플랜트의 운전 조건이 바뀌거나 정상 범위를 벗어나는 경우 공정 거동 분석에 있어 제한적인 수밖에 없으며 특히 플랜트의 안정성 타진이나 제어 논리 구현에 적절히 활용되지 못하는 단점을 가지고 있다³⁾.

본 논문에서는 가스화 공정의 제반 운전 변수가 합성가스의 조성이나 반응 온도, 탄소 전환율 등에 미치는 영향을 정량적이고 동적으로 예측하기 위해 지금까지 문헌상에 보고된 화학 반응에 대한 속도론 정보와 수식개방형 공정 모사 프로그램의 하나인 gPROMS를 이용하여 모델링한 결과에 대해 소개하고자 한다.

2. 수학적 모델

2.1 열분해(pyrolysis)

석탄의 열분해 단계에서는 석탄이 촉(char)와 휘발 성분으로 분리된다.



열분해 반응에 참여하는 화학종 S_i 의 반응계수 $\nu_{S_i}^P$ 는 열분해 생성물 중의 화학종 S_i 의 질량 분율 $\lambda_{S_i}^{pyro}$ 로부터 다음과 같이 구할 수 있다.

$$\nu_{S_i}^P = - \frac{\lambda_{S_i}^{pyro} w_{coal}}{w_{S_i}} \nu_{coal} \quad (1)$$

$$(S_i = CO, H_2, CO_2, H_2O, H_2S, N_2, CH_4, C_6H_6)$$

여기서 w_{S_i} 는 화학종 S_i 의 분자량이며 w_{coal} 과 w_{char} 는 석탄과 촉의 평균분자량이다. $\lambda_{S_i}^{pyro}$ 는 압력의 함수이며 본 논문에서는 압력의 영향을 다음의 Eq. 2와 같이 고려하였다⁴⁾.

$$\lambda_{S_i}^{pyro} = \{1 - 0.066 \ln(p)\} \lambda_{S_i}^{pyro,s} \quad (2)$$

여기서 $\lambda_{S_i}^{pyro,s}$ 는 1기압 하에서의 값을 나타낸다.

하나의 S_i 분자 내에 존재하는 E_j 원자의 개수를 $\kappa_{S_i}^{E_j}$ 라고하면 원자 수지(atomic balance)로부터 아래와 같은 관계가 성립함을 알 수 있다.

$$\nu_{coal} \kappa_{coal}^{E_j} + \nu_{char}^P \kappa_{char}^{E_j} + \sum_i \nu_{S_i}^P \kappa_{S_i}^{E_j} = 0 \quad (3)$$

Eq. 1에서의 석탄과 촉의 평균분자량은 다음과 같이 정의한다.

$$w_{coal} = \sum_j w_{E_j} \kappa_{coal}^{E_j} \quad (4)$$

$$w_{char} = \sum_j w_{E_j} \kappa_{char}^{E_j} \quad (5)$$

$$(E_j = C, H, O, N, S)$$

여기서 $\kappa_{coal}^{E_j}$ 와 $\kappa_{char}^{E_j}$ 는 각각 Eq. 4와 Eq. 5에 의해 정의되는 하나의 석탄 분자와 촉 분자 내에 존재하는 원자 E_j 의 개수이다. 석탄 분자와 촉 분자의 반응계수를 각각 1과 -1으로 놓고 석탄 분자 내의 탄소 원자의 수를 1이라 놓으면 석탄 내 E_j 원자의 개수는 다음과 같다.

$$\kappa_{coal}^{E_j} = \frac{\lambda_{E_j} w_C}{\lambda_C w_{E_j}} \quad (6)$$

$$(E_j = C, H, O, N, S)$$

여기서, λ_{E_j} 는 석탄의 원소분석(ultimate analysis) 결과에 의해 얻어지는 석탄 내 각 원소의 질량 분율이다. 열분해 과정 전후에서의 화학종 S_i 의 몰(mole) 유량 변화, $f_{S_i}^P$ 는 다음과 같다.

$$f_S^P = \frac{g_S^{in} + g_{coal}^{in}(1 - \lambda_{ash})\lambda_{S_i}^{pyro}}{w_S} \quad (7)$$

$$\left(S_i = CO, H_2, CO_2, H_2O, H_2S, N_2, CH_4, C_6H_6, char, O_2 \right)$$

여기서 f_S^P 는 열분해를 거치고 난 후의 화학종 S_i 의 몰 유량, g_S^{in} 은 열분해 단계로 공급되는 화학종 S_i 의 질량 유량이다. 열분해 단계에서 발생하는 단위 부피당의 열함량 변화, $(d[q]/dt)^P$ 는 다음과 같다.

$$V \left(\frac{d[q]}{dt} \right)^P = - \frac{g_{coal}^{in} \Delta H^P}{w_{coal}} \quad (8)$$

열분해 반응열, ΔH^P 는 아래의 식에 의하여 계산하였다⁹⁾.

$$\Delta H^P = 4200 w_{coal} \left(22.4 \lambda_{VM}^{pyro} - 1548 \frac{\kappa_{coal}^H}{\kappa_{coal}^C} + 820 \right) \quad (9)$$

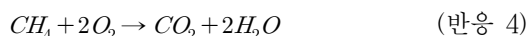
여기서

$$\lambda_{VM}^{pyro} \equiv \sum_i \lambda_{S_i}^{pyro} \quad (10)$$

$$(S_i = CO, H_2, CO_2, H_2O, H_2S, N_2, CH_4, C_6H_6)$$

2.2 휘발 성분 연소

휘발 성분 연소 단계에서는 열분해 과정에서 발생된 휘발성 물질의 연소 반응이 일어난다.



위의 반응 2~반응 4를 차례로 일산화탄소 산화(carbonmonoxide oxidation, CO), 수소 산화(hydrogen oxidation, HO), 메탄 산화(methane oxidation, MO) 반응이라고 부르기로 하면 휘발 성분 연소 반응을 반응계수를 이용하여 다음과 같이 표현할 수 있다.

$$\sum_i \nu_{S_i}^R S_i = 0, \quad \Delta H^R \quad (11)$$

$$(S_i = CO, H_2, CO_2, H_2O, CH_4, C_6H_6, O_2)$$

$$(R = CO, HO, MO)$$

휘발 성분 연소 반응의 속도 상수 k^R 과 반응속도 r^R 은 충돌인자 A^R 과 활성화 에너지 E^R , 온도에 대한 반응차수, n^R 을 사용하여 아래와 같이 나타낼 수 있다.

$$k^R = A^R T^{m^R} e^{-\frac{E^R}{R_y T}} \quad (12)$$

$$(R = CO, HO, MO)$$

$$r^{CO} = k^{CO} [CO]^{\nu_{CO}^{CO}} [O_2]^{\nu_{O_2}^{CO}} \quad (13)$$

$$r^{HO} = k^{HO} [H_2]^{\nu_{H_2}^{HO}} [O_2]^{\nu_{O_2}^{HO}} \quad (14)$$

$$r^{MO} = k^{MO} [CH_4]^{\nu_{CH_4}^{MO}} [O_2]^{\nu_{O_2}^{MO}} \quad (15)$$

여기서 $[S_i]$ 는 화학종 S_i 의 몰농도이며 반응계수 $\nu_{S_i}^R$ 의 정의는 Eq. 11에 따른다. R_y 은 기체상수이며 T 는 반응기의 온도이다. 휘발 성분 연소 반응에 의한 단위 시간당 몰농도 변화량 $(d[S_i]/dt)^V$ 과 열함량 변화량 $(d[q]/dt)^V$ 는 아래와 같다.

$$\left(\frac{d[S_i]}{dt} \right)^V = - \sum_R \nu_{S_i}^R r^R \quad (16)$$

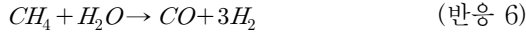
$$\left(\frac{d[q]}{dt} \right)^V = - \sum_R r^R \Delta H^R \quad (17)$$

$$(S_i = CO, H_2, CO_2, H_2O, CH_4, O_2)$$

$$(R = CO, HO, MO)$$

2.3 수성 변위 및 메탄 개질

이 단계에서는 일산화탄소가 수증기와 반응하여 이산화탄소와 수소를 생성하며(수성가스 변위 반응) 메탄은 수증기와 반응하여 일산화탄소와 수소를 발생시킨다.



수성가스 변위반응의 정반응과 역반응을 각각 WGSf (forward water gas shift), WGSb(backward water gas shift) 반응, 메탄과 수증기의 반응을 SMR(steam methane reformation) 반응이라 부르기로 하면 이들 반응의 속도 상수 k^R 과 반응속도 r^R 은 충돌인자 A^R 과 활성화 에너지 E^R 을 사용하여 아래와 같이 표현된다.

$$k^R = A^R e^{-\frac{E^R}{R_0 T}} \quad (18)$$

($R = WGSf, WGSb, SMR$)

$$r^{WGSf} = k^{WGSf} [CO]^{v_{CO}^{WGSf}} [H_2O]^{v_{H_2O}^{WGSf}} \quad (19)$$

$$r^{WGSb} = k^{WGSb} [CO_2]^{v_{CO_2}^{WGSb}} [H_2]^{v_{H_2}^{WGSb}} \quad (20)$$

$$r^{SMR} = k^{SMR} [CH_4]^{v_{CH_4}^{SMR}} [H_2O]^{v_{H_2O}^{SMR}} \quad (21)$$

수성가스 변위반응에 의한 단위시간당 몰농도 변화량 $(d[S_i]/dt)^G$ 과 열함량 변화량 $(d[q]/dt)^G$ 는 아래와 같다.

$$\left(\frac{d[S_i]}{dt}\right)^G = -\sum_R v_{S_i}^R r^R \quad (21)$$

$$\left(\frac{d[q]}{dt}\right)^G = -\sum_R r^R \Delta H^R \quad (22)$$

($S_i = CO, H_2O, CO_2, H_2$)

($R = WGSf, WGSb, SMR$)

2.4 창의 가스화

최의 가스화 단계에서는 최 입자가 산소, 수증기, 이산화탄소와 각각 반응하여 부분 산화(partial oxidation, PO), 수성가스 반응(water gas reaction, WG), Boudouard 반응(BD)을 일으킨다. 이들 반응에서 각 반응 계수들은 다음과 같은 관계를 가진다⁴⁾.

$$v_{char}^R \kappa_{char}^C \kappa_{char}^H \kappa_{char}^O \kappa_{char}^N \kappa_{char}^S \kappa_{char}^S + \sum_i v_{S_i}^R S_i = 0, \Delta H^R \quad (23)$$

$$v_{O_2}^{FO} = \left(\frac{\kappa_{char}^C}{\phi} - \frac{\kappa_{char}^O}{2} + \frac{\kappa_{char}^H}{4} - \frac{\kappa_{char}^S}{2} \right) v_{char}^{FO} \quad (24)$$

$$v_{CO}^{BD} = -2 v_{CO_2}^{BD} \quad (25)$$

$$v_{char}^R \kappa_{char}^{E_j} + \sum_i v_{S_i}^R \kappa_{S_i}^{E_j} = 0 \quad (26)$$

($S_i = CO, H_2, CO_2, H_2O, H_2S, N_2, O_2$)

($R = PC, WG, BD$)

($E_j = C, H, O, N, S$)

여기서 ϕ 는 최의 부분 연소와 완전 연소의 상대 크기를 나타내는 파라미터로서 최 입자의 크기에 따라 다음과 같이 주어진다.

$$\phi = \frac{2Z+2}{Z+2} \quad (d_s < 10^{-5}m) \quad (27)$$

$$\phi = \frac{(2Z+2) - \frac{Z(d_s - 0.005)}{0.095}}{Z+2} \quad (28)$$

$$(10^{-5}m < d_s < 10^{-3}m)$$

$$\phi = 1 \quad (10^{-3} < d_s) \quad (29)$$

여기서

$$Z = \frac{[CO]}{[CO_2]} \quad (30)$$

단위 최입자의 반응속도 모델은 무작위 기공 모델(random pore model)을 사용하였다⁶⁾. 무작위 기공 모델로부터 최의 전환율 X 는,

$$X = 1 - e^{-kt \left(1 + \frac{kw}{4} t\right)} \quad (31)$$

단위 시간동안의 최의 질량변화량 dm_{char}/dt 는 다음과 같다.

$$\frac{dm_{char}}{dt} = -g_{char}^{C, in} [X]_{\min(t, t_r)} \quad (32)$$

여기서 $g_{char}^{C,in}$ 는 가스화기로 유입되는 화의 질량 유량이며 t_r 은 화입자의 가스화기 내 체류시간이다. $[X]_t$ 는 시각 t 에서의 전환율 값이다. Eq. 31에서의 속도 상수 k 는 각각의 화의 가스화 반응 속도 상수, k^R 를 더한 값이다. 이때 k^R 는 다음과 같이 주어진다.

$$k^R = A^R (p^R)^{n^R} e^{-\frac{E^R}{R_g T}} \quad (33)$$

$(R = PC, WG, BD)$

여기서 P^R 와 n^R 는 반응 R 에서의 기체 반응제의 분압 및 이 반응제에 대한 반응 차수이다. 가스화 단계에서 일어나는 화학종 S_i 의 몰농도 변화 $(d[S_i]/dt)^C$ 와 열함량 변화 $(d[q]/dt)^C$ 는 다음과 같다.

$$\left(\frac{d[char]}{dt}\right)^C = \frac{1}{w_{char} V} \left(\frac{dm_{char}}{dt}\right) \quad (34)$$

$$\left(\frac{d[S_i]}{dt}\right)^C = \frac{1}{k} \left(\sum_R \frac{V_S^R k^R}{V_{char}^R}\right) \left(\frac{d[char]}{dt}\right)^C \quad (35)$$

$$\left(\frac{d[q]}{dt}\right)^C = \frac{1}{k} \left(\sum_R k^R \Delta H^R\right) \left(\frac{d[char]}{dt}\right)^C \quad (36)$$

$(S_i = O_2, CO, H_2O, H_2, CO_2)$
 $(R = PO, WG, BD)$

2.5 물질 및 열 수치

열 및 물질 수치는 아래와 같다.

$$V \frac{dT}{dt} \sum_i [S_i] w_{S_i} c_{S_i} = \sum_i f_{S_i}^{in} h_{S_i}^{in} - \sum_i f_{S_i} h_{S_i} + V \sum_U \left(\frac{d[q]}{dt}\right)^U - uA(T - T_w) \quad (37)$$

$$\frac{d[S_i]}{dt} = \frac{f_{S_i}^{in} - f_{S_i}}{V} + \sum_U \left(\frac{d[S_i]}{dt}\right)^U \quad (38)$$

$(S_i = CO, H_2, CO_2, H_2O, H_2S, N_2, CH_4, C_6H_6, char, O_2)$
 $(U = P, V, G, C)$

여기서 c_{S_i} 는 화학종 S_i 의 비열용량이며 $h_{S_i}^{in}$ 와 h_{S_i} 는 반응기로 유입되고 나가는 화학종 S_i 의 1몰당 열함량을 각각 나타낸다. u 는 열손실 계수이며 A 는 반응기의 내부 표면적이다. 반응기를 빠져나가는 화학종의 유량 f_{S_i} 은 다음과 같이 부피유량 v_{S_i} 으로 나타낼 수 있다.

$$f_{S_i} = v_V [S_i] \quad (39)$$

$(S_i = CO, H_2, CO_2, H_2O, H_2S, N_2, CH_4, C_6H_6, char, O_2)$

기체의 부피유량, v_V 는 정상 상태에서의 값으로 근사하였으며 Eq. 38의 우변을 0으로 놓음으로써 다음과 같이 구할 수 있다.

$$v_V = \frac{8.314T}{p} \left\{ \sum_i f_{S_i}^{in} + V \sum_i \sum_U \left(\frac{d[S_i]}{dt}\right)^U \right\} \quad (40)$$

$(S_i = CO, H_2, CO_2, H_2O, H_2S, N_2, CH_4, C_6H_6, O_2)$

2.6 화 입자의 반응기내 체류시간

고체 입자의 유동은 Stokes 법칙을 따른다고 가정하며 반응기 내에서의 화 입자의 하강속도 v_s 는 다음과 같다⁴⁾.

$$v_s = v_s^i e^{-bt} + (v_g - v_s^t)(1 - e^{-bt}) \quad (41)$$

$$v_s^t = \frac{(\rho_s - \rho_g) d_s^2 g}{18\mu} \quad (42)$$

$$b \equiv \frac{18\mu}{\rho_s d_s^2} \quad (43)$$

여기서 v_s^i 와 v_s^t 는 화 입자의 반응기 유입 속도와 극한 속도를 각각 의미하여 v_g 는 기체의 속도, d_s 는 화 입자의 직경, μ 는 기체의 점도이다. ρ_s 와 ρ_g 는 각각 화 입자와 기체의 밀도를 나타내며 g 는 중력상수이다. 윗 식을 적분하면 반응기의 길이 L 과 화입자의 반응기 내 체류시간 t_r 간의 관계를 얻을 수 있다. 즉,

$$L = \int_0^{t_r} v_s dt \quad (44)$$

의 관계로부터²⁾,

$$L = (1 - e^{-bt_r}) \frac{v_s^i}{b} + (v_g - v_s^i) \left(t_r - \frac{1 - e^{-bt_r}}{b} \right) \quad (45)$$

위 식을 이용하여 주어진 L 에서 t_r 을 계산할 수 있으며 이때 ρ_g, μ, v_g 는 반응기로 유입되는 조건에서의 값을 이용하고 최 입자의 밀도 ρ_s 는 반응의 진행에 따른 성분 변화를 고려하여 다음과 같이 반응기 전, 후단에서의 밀도, ρ_s^{in} 와 ρ_s^{out} 를 평균한 값을 이용한다.

$$\rho_s = \rho_s^{in} \rho_s^{out} \sqrt{\frac{2}{(\rho_s^{in})^2 + (\rho_s^{out})^2}} \quad (46)$$

반응기 후단에서의 최 입자의 밀도는 회분의 밀도와 동일하다고 가정한다. 즉,

$$\rho_s^{out} = \rho_{coal}(1 - \gamma_{H_2O})\gamma_{ash} \quad (47)$$

여기서 γ_{H_2O} 는 석탄 중의 수분 함량이다. 기체의 속도는 부피유량을 반응기의 단면적으로 나누어줌으로써 구할 수 있다.

$$v_g = \frac{4v_V}{\pi D^2} \quad (48)$$

여기서 D 는 반응기의 직경이다. 마지막으로 기체의 밀도 ρ_g 는 다음과 같다.

$$\rho_g = \sum_i w_{s_i} [S_i] \quad (49)$$

2.7 수치해석 개요

상기의 수학적 모델에 근거하여 분류층 가스화기의 가스화 반응을 상용 공정 해석 프로그램 중 하나인 gPROMS를 사용하여 모델링하였다. gPROMS에서 사용하는 미분대수식(differential algebraic equations, DAEs)의 선형화 방법을 소개하면 다음과 같다.

gPROMS가 푸는 연립 비선형 미분대수식은 다음과 같은 일반적인 형태로 나타낼 수 있다.

$$f(x, x', y, u) = 0 \quad (50)$$

여기서 x 와 y 는 각각 미분 및 대수 변수이며 x' 는 x 를 시간으로 미분한 값이다. u 는 시간에 의존하는 입력 계수이다. Eq. 50을 미분하면,

$$\left(\frac{\partial f}{\partial x} \right)_{x',y,u} \delta x + \left(\frac{\partial f}{\partial x'} \right)_{x,y,u} \delta x' + \left(\frac{\partial f}{\partial y} \right)_{x',x,u} \delta y + \left(\frac{\partial f}{\partial u} \right)_{x',x,y} \delta u = 0 \quad (51)$$

여기서,

$$\delta z \equiv z - z^* \quad (52)$$

$$(z = x, x', y, u)$$

이며 z^* 는 주어진 시간 t 에서의 값을 말한다.

행렬 $[\partial f/\partial x', \partial f/y]$ 가 특이성을 갖지 않을 경우 (non-singular) 아래와 같이 Eq. (50)의 선형화된 형식을 얻을 수 있다.

$$\begin{bmatrix} \delta x' \\ \delta y \end{bmatrix} = - \begin{bmatrix} \partial f / \partial x' & \partial f / \partial y \end{bmatrix}^{-1} \begin{bmatrix} \partial f / \partial x & \partial f / \partial u \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \delta x \\ \delta u \end{bmatrix} \quad (53)$$

gPROMS의 DAEs 해석 모듈 중 하나인 DASOLV는 시간 간격과 역행미분(backward differentiation)의 차수를 시간에 따라 변화시켜가면서 Eq. 53을 풀게 된다.

3. 시험 계산 조건

본 모델링에 사용된 주요 입력 값은 다음과 같다.

Table 1 Elemental composition of coal (wet basis, wt.%)

λ_C	λ_H	λ_O	λ_N	λ_S
82.0	5.1	1.7	10.3	0.9

Table 2 Injection flow rates of coal and gases (kgs⁻¹)

g_{coal}^{in}	$g_{H_2O}^{in}$	$g_{N_2}^{in}$
28.49	1.2	5.72

Table 3 Composition of pyrolysis product of coal (dry basis, wt.%)²⁾

γ_{CO}^{pyro}	$\gamma_{H_2}^{pyro}$	$\gamma_{CO_2}^{pyro}$	$\gamma_{H_2O}^{pyro}$	$\gamma_{H_2S}^{pyro}$	$\gamma_{N_2}^{pyro}$	$\gamma_{CH_4}^{pyro}$	$\gamma_{C_2H_6}^{pyro}$	γ_C^{pyro}	$\gamma_{O_2}^{pyro}$
2.8	0.2	4.4	1.8	3.4	2.8	16.4	7.1	1.2	3.2

Table 4 Heat of volatile combustion reactions (Jmol⁻¹)⁷⁾

ΔH^{CO}	ΔH^{HO}	ΔH^{MO}
-2.83×10 ⁵	-2.42×10 ⁵	-3.57×10 ⁴

Table 5 Frequency factors of volatile combustion reactions (m^{1.5}mol^{-0.5}s⁻¹)⁷⁾

A^{CO}	A^{HO}	A^{MO}
2.2×10 ⁹	6.8×10 ¹¹	3.6×10 ⁴

Table 6 Activation energies of volatile combustion reactions (Jmol⁻¹)⁷⁾

E^{CO}	E^{HO}	E^{MO}
1.67×10 ⁵	1.68×10 ⁵	1.26×10 ⁵

Table 7 Frequency factors of gasification reactions of char (MPa⁻ⁿs⁻¹)⁷⁾

A^{PC}	A^{WG}	A^{BD}
1.36×10 ⁶	8.55×10 ⁴	6.78×10 ⁴

Table 8 Activation energies of gasification reactions of char (Jmol⁻¹)⁷⁾

E^{PC}	E^{WG}	E^{BD}
1.30×10 ⁵	1.40×10 ⁵	1.63×10 ⁵

Table 9 Orders of gasification reactions of char⁷⁾

n^{PC}	n^{WG}	n^{BD}
0.68	0.84	0.73

Table 10 Specific heats of gasification reactions of char (Jkg⁻¹)⁷⁾

ΔH^{PC}	ΔH^{WG}	ΔH^{BD}
-9.25×10 ⁶	1.43×10 ⁷	1.09×10 ⁷

Table 11 Frequency factors of water gas shift reaction and steam methane reformation reaction (m³mol⁻¹s⁻¹)⁸⁾

A^{WGSf}	A^{WGSb}	A^{SMR}
2.78	0.0265	4.4×10 ⁸

Table 12 Activation energies of water gas shift reaction and steam methane reformation reaction (Jmol⁻¹)⁸⁾

E^{WGSf}	E^{WGSb}	E^{SMR}
1.26×10 ⁴	6.58×10 ⁵	1.68×10 ⁵

Table 13 Heats of water gas shift reaction and steam methane reformation reaction (Jmol⁻¹)⁸⁾

ΔH^{WGSf}	ΔH^{WGSb}	ΔH^{SMR}
-4.11×10 ⁴	4.11×10 ⁴	2.06×10 ⁵

Table 14 Properties of reactor

D (m)	L (m)	u (Js ⁻¹ m ⁻² K ⁻¹) ⁴⁾	p (Pa)	T_w (K)
3.31	5.0	141.86	4.0×10 ⁶	1,073

Table 15 Properties of coal and char

d_s (m)	ρ_{coal} (kgm ⁻³)	ρ_s^{in} (kgm ⁻³)	γ_{ash} (wt.%)	γ_{H_2O} (wt.%)
1.0×10 ⁻⁴	1.5×10 ³	284	10	10.7

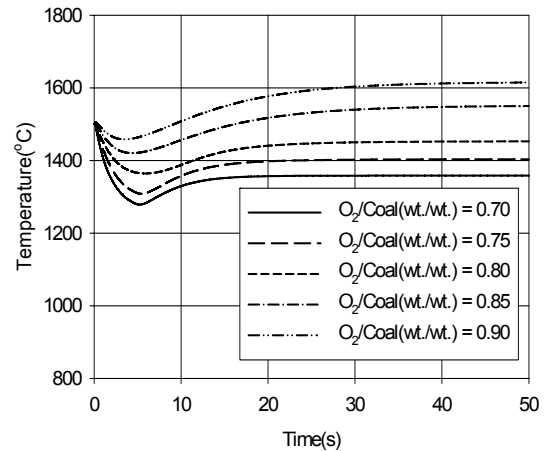


Fig. 1 Time variation of reaction temperature under various O₂/coal ratios

4. 계산 결과 및 토의

4.1 산소 대 석탄 주입비의 영향

Figs. 1~4에는 가스화 공정에서 가장 중요한 공정 변수 중의 하나인 산소와 석탄의 주입비(질량비, 이하 O₂/coal비)가 반응기의 온도와 탄소전환율, 합

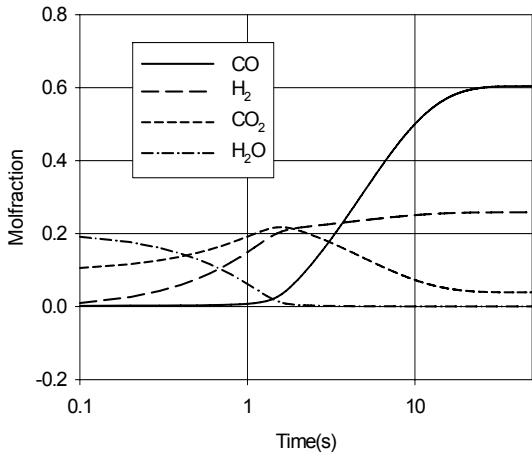


Fig. 2 Time variation of molfractions under $O_2/coal$ ratio of 0.85

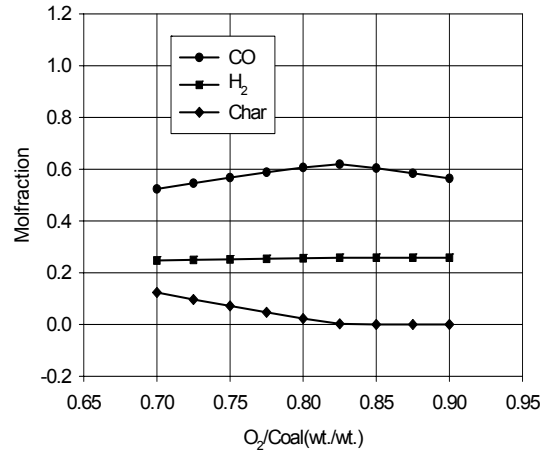


Fig. 4 Relation between steady-state molfractions and $O_2/coal$ ratio

성가스 조성에 미치는 영향을 나타내었다. Fig. 1에서 보듯 반응 온도는 석탄 주입 직후 약 5초 동안 감소하다가 다시 증가하는 모습을 보인다. 최악의 가스화 반응 중 산소와의 부분 산화 반응은 발열반응인 반면 수성가스 반응이나 Boudouard 반응은 흡열반응이다. 석탄이 주입되는 시점, 즉 $t=0$ 에서의 조건은 천연가스의 연소 후 조건과 유사하게 설정하였으므로 반응 초기에는 이산화탄소와 수증기가 최악 반응함에 따라 반응기의 온도가 내려가게 되고

시간이 흐르면서 수증기와 이산화탄소의 농도가 감소함에 따라 최악과 산소 간의 발열 반응이 상대적으로 우세하게 되어 온도가 재상승하는 것으로 생각된다. 이러한 경향을 Fig. 2에 도시하였다.

일반적으로 반응기의 온도와 탄소전환율은 $O_2/coal$ 비가 높을수록 증가하는 경향을 볼 수 있다. 특히 가스화 공정의 효율을 나타내는 지표 중 하나인 탄소 전환율은 $O_2/coal$ 비가 0.8을 넘어서는 순간 거의 1.0에 가까워짐을 Fig. 3를 통해 알 수 있다. Fig. 4에는 합성가스의 주요 성분인 일산화탄소와 수소, 그리고 반응하지 않은 최악의 몰농도가 정상상태에서 $O_2/coal$ 비에 따라 어떻게 변화하는지를 나타내고 있다. 탄소 전환율이 1.0에 가까워지는 $O_2/coal$ 비의 값인 0.8에서 미반응 최악의 농도가 0에 가까워짐을 확인할 수 있다.

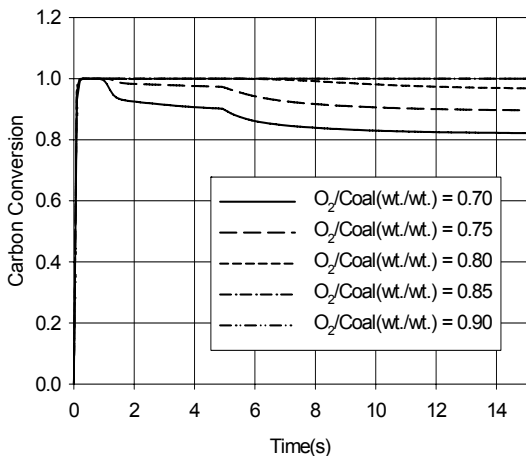


Fig. 3 Time variation of carbon conversion under various $O_2/coal$ ratios

수소의 농도가 $O_2/coal$ 비에 관계없이 약 0.25로 일정하게 유지됨에 반해 일산화탄소의 몰농도는 초기에는 $O_2/coal$ 비에 비례하여 증가하다가 $O_2/coal$ 비가 0.85를 넘어서면 다시 감소하는 경향을 보이며 이는 이중원 등의 모델링 결과와 일치하는 현상이다¹⁾. 즉 산소 주입량이 최악의 반응에 필요한 이상이 되면 잉여의 산소가 휘발 성분 연소 반응(반응 2~4)을 촉진시켜 일산화탄소와 수소, 메탄을 이산화탄소와 수증기로 전환시키는 반응이 일어나 이들의

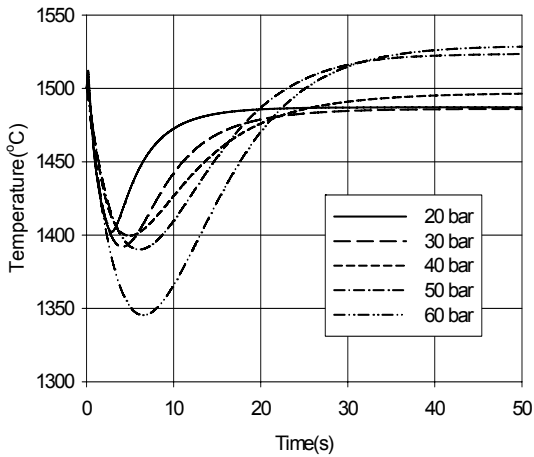


Fig. 5 Time variation of reaction temperature under various pressures of reactor

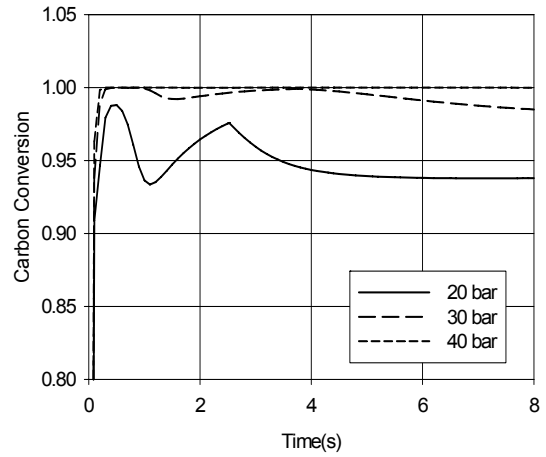


Fig. 6 Time variation of carbon conversion under various pressures of reactor

농도가 감소하는 것으로 생각된다. 다만, 수소의 농도는 이러한 경향을 나타내지 않는데 이는 잉여의 산소와 휘발성분 간의 반응에 의해 생성된 수증기가 수성변위 반응과 증기-메탄 반응(반응 5~6)을 일으켜 다시 수소를 생산함에 따라 잉여 산소의 영향을 상쇄시키기 때문인 것으로 해석된다. 수증기에 의한 수성변위 반응과 증기메탄 반응은 일산화탄소와 메탄을 소비시키는 반응이므로 일산화탄소의 농도는 이러한 상쇄효과를 보이지 않는다.

4.2 반응기 압력의 영향

Fig. 5와 Fig. 6에는 반응 온도와 탄소 전환율에 미치는 반응기 압력의 영향을 나타내었다. 가장 직접적으로 압력의 영향을 받는 것은 Eq. 2에서 보듯 열분해 반응에 의해 생성되는 휘발성 물질의 양이다. 열분해 반응의 수율은 압력이 높을수록 낮아지게 되며 이에 따라 열분해 결과 생성되는 휘발성 물질의 연소 반응도 함께 줄어들 것임을 예상할 수 있다. 압력이 낮아 휘발 성분의 생성이 많을수록 이들의 연소 반응이 활발히 일어나며 따라서 최악의 흡열 반응으로 인한 반응기의 초기 온도 저하 폭을 줄이게 됨을 Fig. 5에서 확인할 수 있다. 하지만 정상 상태에 이르게 되면 압력 상승에 따른 전반적인 기체

상 반응의 촉진 효과가 나타나 반응기의 온도는 압력이 높을수록 높아짐을 볼 수 있다. Fig. 6에는 압력 변화에 따른 탄소 전환율의 동적 거동을 도시한 것이다. 압력이 높을수록 탄소 전환율이 향상되는 모습을 볼 수 있으며 이것은 Eq. 33에서 보듯 산소, 수증기, 이산화탄소의 분압 상승에 따른 속도상수 증가에 기인한 것으로 사료된다. 압력 증가에 따른 촉 반응성의 향상은 Fig. 5에서 반응 온도의 초기 저하 폭이 압력에 비례하여 커지는 것을 아울러 설명할 수 있다.

4.3 수증기 대 석탄 주입비의 영향

Figs. 7~9는 합성가스 조성, 온도, 탄소 전환율에 미치는 단위 석탄량(kg) 당의 수증기 주입량(kg), 즉 H₂O/coal비의 영향을 도시한 것이다. 수증기는 합성가스의 조성 변화에 가장 큰 영향을 미치는 공정 변수인 것으로 알려져 있다. 이러한 효과를 확인하기 위하여 H₂O/coal비를 0.017에서 0.705까지 변화시켜가면서 정상상태에서의 합성가스 조성이 어떻게 변화하는지를 나타낸 것이 Fig. 7이다. 기존에 알려진 바와 같이 상대적인 수증기 주입량이 증가할수록 생성되는 합성가스 중의 일산화탄소 농도는 낮아지는 반면 수소와 미반응 촉의 농도는 높아짐

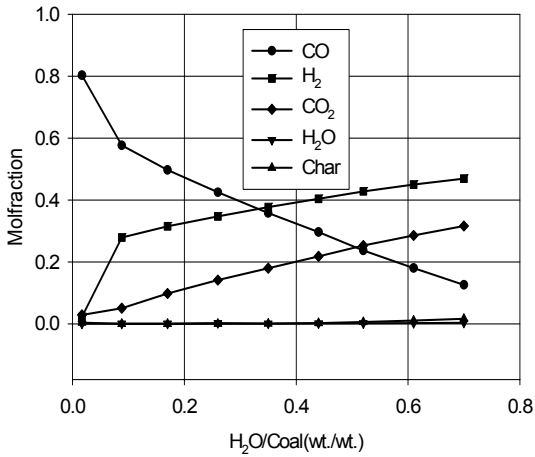


Fig. 7 Relation between steady-state molfractions and H₂O/coal ratio

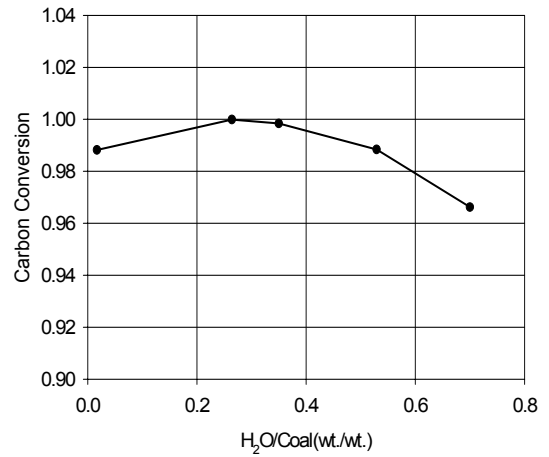


Fig. 9 Relation between steady-state carbon conversion and H₂O/coal ratio

을 볼 수 있다. 수증기는 촉와 반응하여 일산화탄소와 수소를 발생시키지만(수성가스 반응) 이렇게 생성된 일산화탄소를 수성가스변위반응(반응 5)을 통해 수소로 전환시키는 역할을 하기 때문에 전체적으로 수증기는 합성가스 중의 일산화탄소 농도를 낮추고 수소의 농도를 높인다. 수소의 농도를 높이고 일산화탄소의 농도를 낮추는 과정은 전체적으로는 발열 반응이지만 200°C의 저온으로 주입되는 수증기가 반응열을 흡수하는 효과가 더 크기 때문에

H₂O/coal비와 반응 온도는 반비례함을 Fig. 9에서 확인할 수 있다. 반응기의 낮은 온도는 또한 촉의 활성을 떨어뜨려 Fig. 7에서와 같이 높은 H₂O/coal비 하에서 미반응 촉의 농도를 높이는 결과를 가져오며 Fig. 9에서 보는 것처럼 탄소 전환율이 H₂O/coal비가 약 0.2 이상에서 저하되는 현상을 야기한다. 다만 수증기 자체가 수성변위반응의 반응제이기 때문에 H₂O/coal비가 0.017일 때보다 0.264일 때 반응 온도가 더 낮음에도 불구하고 높은 탄소 전환율을 보인

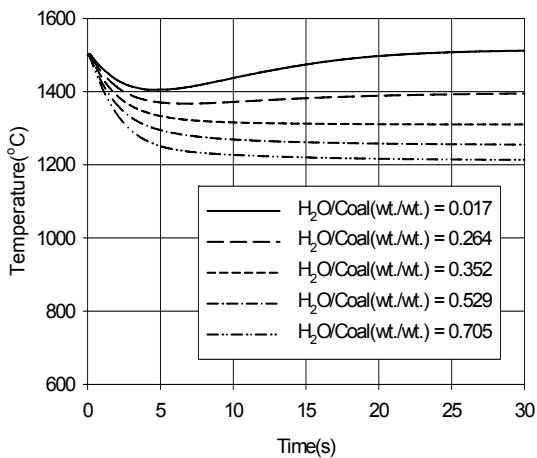


Fig. 8 Time variation of reaction temperature under various H₂O/coal ratios

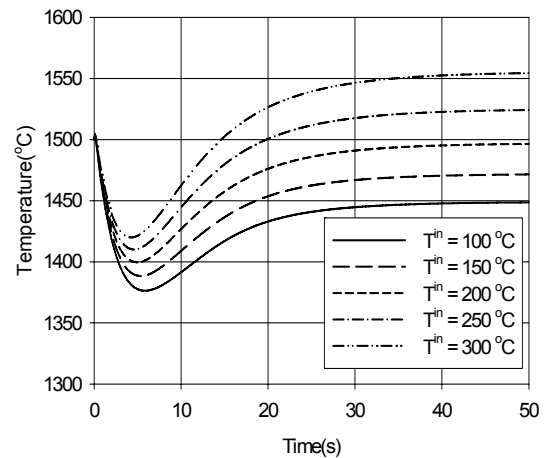


Fig. 10 Time variation of reaction temperature under various inlet temperatures of blast gases and coal

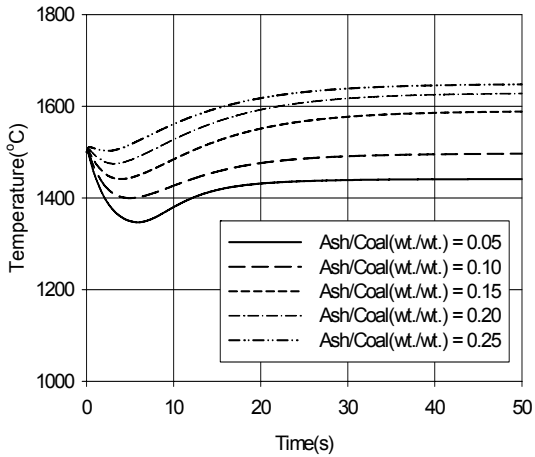


Fig. 11 Time variation of reaction temperature under various ash/coal ratios

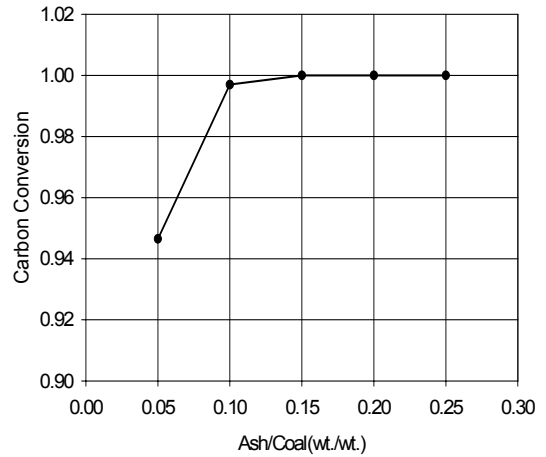


Fig. 13 Relation between steady-state carbon conversion and ash/coal ratio

다. 수증기의 양이 충분할 때에는 촉와 산소와의 발열 반응에 비해 수증기와의 흡열 반응이 우세해짐에 따라 초기에 떨어졌던 반응 온도가 다시 상승하지 않음을 Fig. 8을 통하여 알 수 있다.

4.4 석탄 및 반응제 주입 온도의 영향

Fig. 10은 주입되는 석탄과 산소, 수증기의 온도가 반응기 온도에 미치는 영향을 살펴 본 것이다. 주

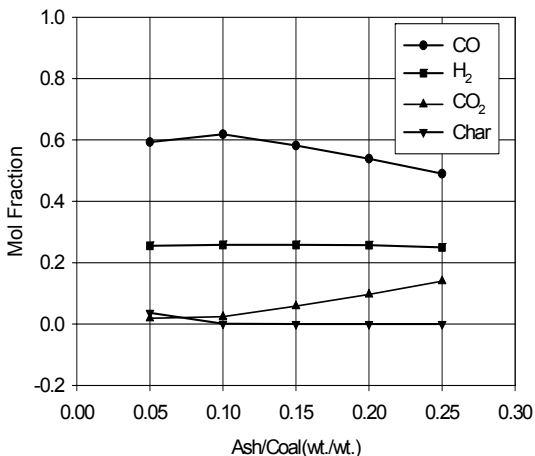


Fig. 12 Relation between steady-state molfractions and ash/coal ratio

입 온도를 200°C 높여줌에 따라 정상상태에서의 반응기 온도가 약 100°C 상승함을 알 수 있다.

4.5 석탄 중 회분 함량의 영향

Figs. 11~13에서는 다양한 회분 함량을 가진 석탄을 연료로 사용할 경우 어떤 영향을 나타낼 지를 계산한 결과이다. 주어진 O_2 /coal비 하에서 석탄 중의 회분 함량이 높다는 것은 석탄 내의 단위 질량의 탄소와 반응하는 산소의 양이 증가하는 것이므로 O_2 /coal비를 높이는 것과 유사한 영향이 나타난다. 즉 회분 함량이 높은 연료를 사용할 경우 반응기의 온도가 증가하며(Fig. 11) 합성가스 중의 수소 농도는 거의 일정한 반면 일산화탄소의 농도는 감소하는 경향을 보인다(Fig. 12). 특히 Fig. 12에서는 회분 함량이 높을 경우 잉여 산소에 의한 완전 연소 반응이 촉진되어 이산화탄소의 농도가 증가함을 확연하게 보여주고 있다. Fig. 13에 나타난 탄소 전환율과 회분 함량과의 비례관계도 O_2 /coal비를 상승시키는 것과 같은 효과로 설명될 수 있다.

4.6 촉 입경의 영향

Figs. 14~17은 촉 입자의 크기가 반응온도와 합성가스 조성, 탄소전환율에 어떠한 영향을 미치는

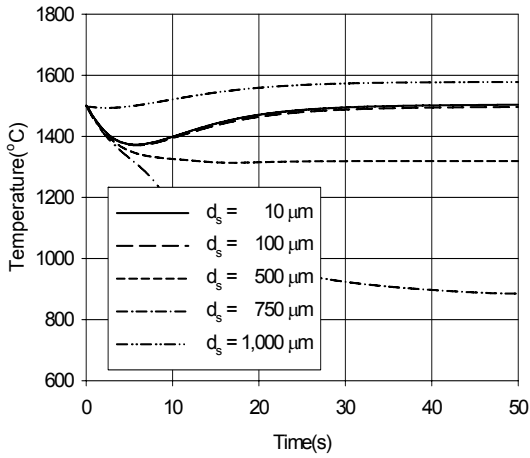


Fig. 14 Time variation of reaction temperature under various diameters of char

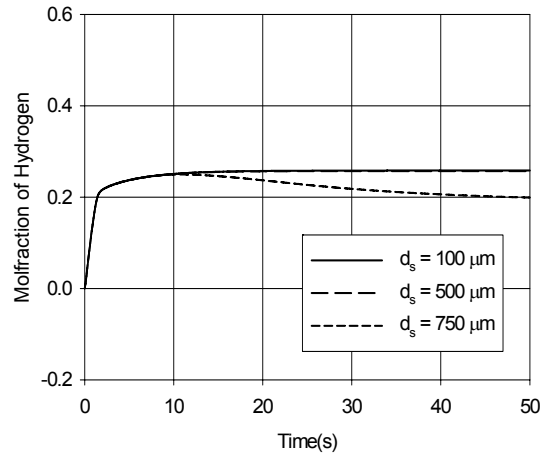


Fig. 16 Time variation of molfraction of hydrogen under various diameters of char

지를 조사한 결과이다. 석탄의 분쇄 과정에서 에너지 소모가 많으므로 적절한 입경을 결정하는 것은 공정의 효율 면에서 중요하다. 입경은 Eqs. 27~29에서 보는 바와 같이 최의 완전 연소와 부분 연소의 상대적 크기를 결정한다. 즉 최의 입경이 크면 최 내부까지 산소가 침투하기 어려워지므로 부분 산화가 우세해지며 미반응 최의 농도를 높리게 된다. Fig. 14에서는 최의 입경을 10~1,000 μm 로 변화시켜가면서 반응 온도의 변화를 계산한 결과이다.

입경이 10 μm 에서 500 μm 으로 증가함에 따라 최의 부분 연소가 상대적으로 우세해져서 반응기의 온도가 낮아짐을 볼 수 있다. 그러나 입경이 1,000 μm 에서 반응기의 온도가 급격히 상승하는 것은 최가 기류를 타고 상승하지 못하고 아래로 떨어지게 됨에 따라 반응기내 최의 체류시간이 극히 짧아진 결과이다. Fig. 15는 최의 직경과 합성가스 중의 일산화탄소의 농도간의 관계를 나타낸 것이다. 전반적으로는 최 입자의 직경과 일산화탄소의 농도는 반비례

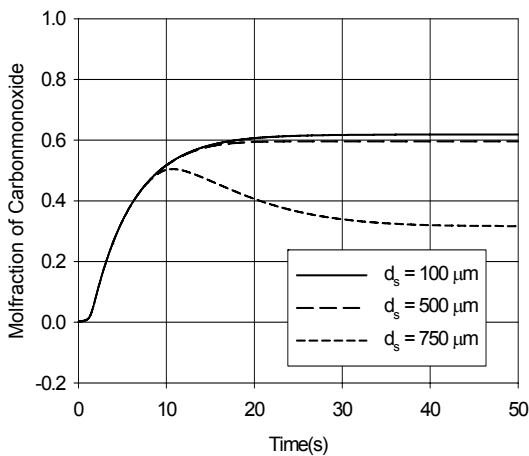


Fig. 15 Time variation of molfraction of carbonmonoxide under various diameters of char

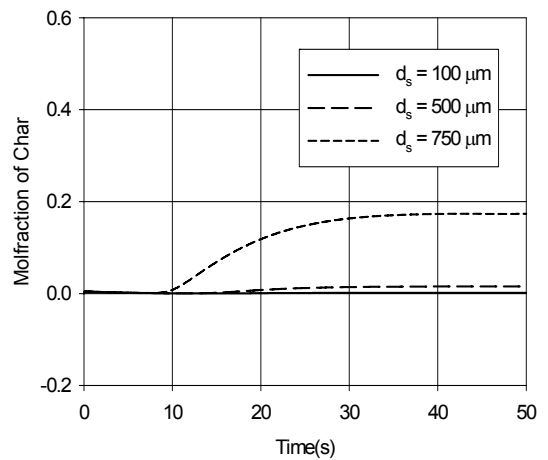


Fig. 17 Time variation of molfraction of char under various diameters of char

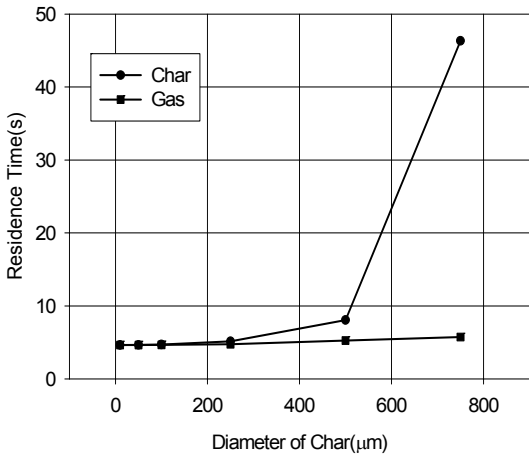


Fig. 18 Relation between steady-state residence times and diameter of char

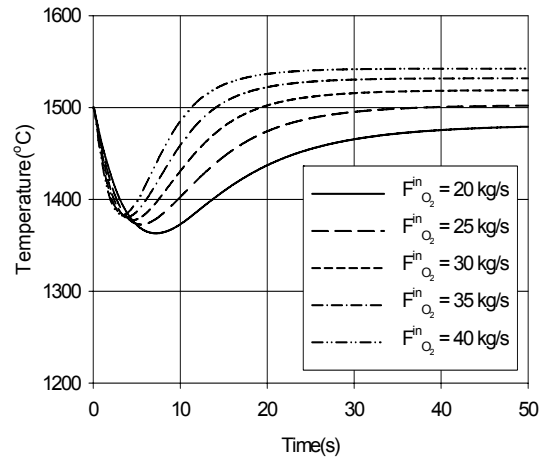


Fig. 19 Time variation of reaction temperature under various feeding rate of oxygen with fixed O₂/coal ratio

관계를 보이며 특히 촉 입자의 직경이 750 μm 인 경우 급격히 농도가 떨어지는 것은 Fig. 17에서 보듯 이 경우 촉의 탄소 전환을 자체가 저조해지기 때문인 것으로 판단된다. 그러나 촉의 입경이 500 μm 이하에서는 이러한 효과가 미미해짐을 아울러 알 수 있다. Fig. 16에서 보이는 바와 같이 수소의 농도에 미치는 촉 입경의 영향은 일산화탄소의 경우보다 상대적으로 적음을 알 수 있다. Fig. 18은 촉 입자의 직경 증가에 따른 반응기내 체류시간 변화를 Eq. 45를 사용하여 계산한 결과를 보여주고 있다. 촉의 직경이 약 200 μm 이하인 경우에는 촉와 기체의 반응기내 체류시간이 거의 동일하나(분류층 반응기) 그 이상이 되면 두 체류시간 간의 차이가 확연해진다. 본 논문에서는 계산을 단순화하기 위해 가스의 흐름이 층류를 형성하며 수직 상승한다고 가정하였으나 실제 상용 가스화 반응기는 다양한 버너의 구조로 인해 복잡한 기체와 입자의 유동을 보일 것으로 생각된다.

4.7 석탄 및 산소 주입량의 영향

마지막으로 Figs. 19~22에는, 가스화기의 출력을 높이기 위하여 O₂/coal비를 일정하게 하고 산소(또는 석탄)의 주입량을 늘렸을 경우의 영향을 나타

내었다. 산소 주입량 증가에 따라 반응 온도가 상승하는 모습을 Fig. 19에서 볼 수 있으며 산소 주입량이 35kg/s 이상에서 합성가스 내 일산화탄소의 농도가 급격히 낮아짐을 Fig. 20에서 확인할 수 있다.

높은 산소 주입량 하에서의 일산화탄소의 농도 하락의 원인 중 하나는 Fig. 22에서 보듯 촉 입자의 반응기내 체류 시간 저하에 따른 결과로 해석할 수 있다. 산소 주입량을 20kg/s에서 40kg/s로 2배 증가 시킴에 따라 체류시간도 약 1/2로 감소하는데, 촉

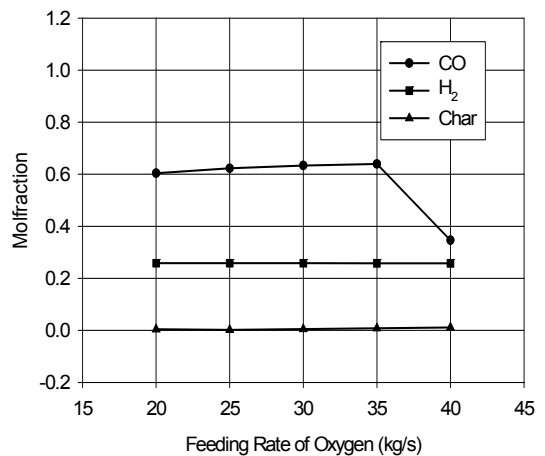


Fig. 20 Relation between steady-state molfractions and feeding rate of oxygen with fixed O₂/coal ratio

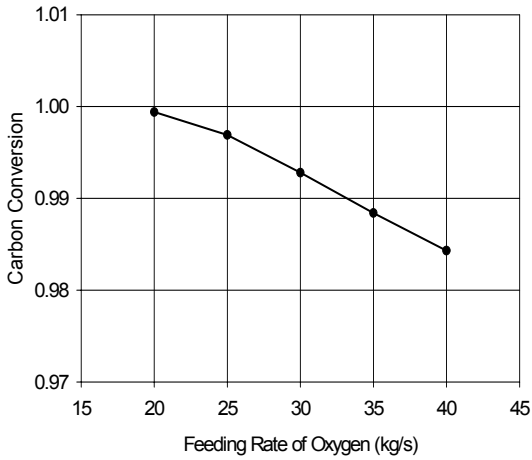


Fig. 21 Relation between steady-state carbon conversion and feeding rate of oxygen with fixed O₂/coal ratio

입경이 1 μ m인 분류층 조건(Fig. 을 감안하면 이는 곧 산소 주입량 증가가 합성가스 생산량 증가로 이어졌음을 암시하는 것이다. 산소 주입량을 40kg/s 까지 늘려도 탄소 전환율이 98% 이상으로 유지됨을 Fig. 21에서 알 수 있다.

5. 결 론

석탄의 가스화 반응에 대한 수학적 모델을 수립

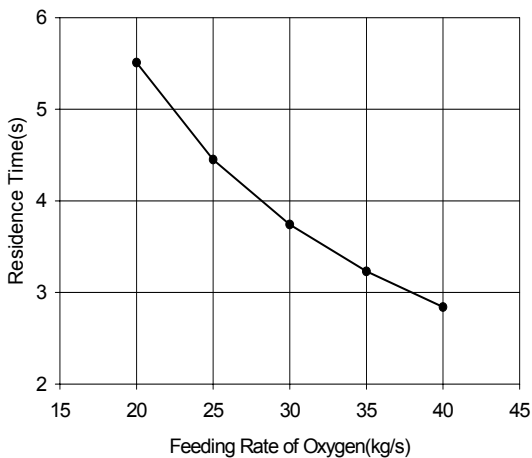


Fig. 22 Relation between steady-state residence time of char and feeding rate of oxygen with fixed O₂/coal ratio

하고 공정 모델링 프로그램인 gPROMS를 이용하여 다양한 공정 조건이 합성가스의 조성과 반응기 온도, 촉 입자의 체류시간 등에 미치는 영향을 계산하였다. 석탄의 가스화 과정은 열분해, 휘발성분 연소, 수성변위 및 메탈 개질, 촉의 가스화 등 다양한 균일 및 불균일 반응으로 구성되며 석탄의 입경 및 조성, O₂/coal비 및 H₂O/coal비, 반응기 압력 등의 공정 변수에 따라 반응기의 온도나 합성가스의 조성이 달라진다. 주요한 결과만을 정리하면 다음과 같다.

- 1) O₂/coal비는 반응기의 온도 변화에 가장 큰 영향을 미치는 공정 인자였으며 O₂/coal비가 0.70에서 0.90으로 변화할 때 정상 상태에서의 온도 상승 폭은 약 250 $^{\circ}$ C였다.
- 2) O₂/coal비가 증가함에 따라 합성가스 중의 일산화탄소 농도는 증가하다가 감소하는 경향을 보였으며 비율이 약 0.85일 때 일산화탄소의 농도가 가장 높게 나왔다.
- 3) H₂O/coal비는 합성 가스 중의 수소 농도를 변화시키는 공정 인자임을 알 수 있었으며 H₂O/coal비를 0.7까지 올리면 수소의 농도가 약 46 mol% 까지 상승하는 것을 확인할 수 있었다.
- 4) 촉 입자의 입경은 탄소 전환율에 영향을 미치는 중요한 공정 변수로 나타났으며 입경이 작을수록 탄소 전환율이 높아지는 경향을 보였다. 입경이 5.0 μ m가 되면 거의 1에 가까운 탄소 전환율을 얻을 수 있음을 확인하였다.
- 5) 가스화기 출력을 높이기 위해 주어진 O₂/coal비 하에서 산소의 주입량을 35kg/s까지 늘려도 합성가스의 조성에는 큰 변화가 없었으며 약 99%에 가까운 탄소 전환율을 얻을 수 있었다.

후 기

본 연구는 2011년도 지식경제부의 재원으로 한국에너지기술평가원(KETEP)의 지원을 받아 수행한 한국형 300MW급 IGCC 실증플랜트 기술개발 사업 연구 과제입니다(No. 2011951010001C).

참고 문헌

- 1) 이중원, 김미영, 지준화, 김시문, 박세익, “석탄 가스화공정 모델링에 관한 연구”, 한국수소 및 신에너지학회 논문집, 제21권 제5호, 2010, pp. 425-343.
- 2) ASPEN Technology, Inc. “ASPEN Plus Model for Entrained Flow Coal Gasifier”, v7.2, <http://support.aspentech.com>
- 3) 김미영, 주용진, 최인규, 이중원, “300MW급 IGCC를 위한 건식 분류층 석탄 가스화 공정의 동적 상태 모사”, 한국수소 및 신에너지학회 논문집 제21권 제5호, 2010, pp. 460-469.
- 4) C. Y. Wen and T. Z. Chaung, “Entrainment Coal Gasification Modeling”, Ind. Eng. Chem. Process Des. Dev., Vol. 18, No. 4, 1979, pp. 684-695.
- 5) Rakesh Govind and Jogen Shah, “Modeling and Simulation of An Entrained Flow Coal Gasifier”, AIChE Journal, Vol. 30, No. 1.
- 6) 지준화, “기공 구조와 반응 부산물의 영향을 고려한 최의 가스화 모델”, 한국수소 및 신에너지학회 논문집, 제21권 제4호, 2010, pp. 328-339.
- 7) H. Watanabe and M. Otaka, “Numerical simulation of coal gasification in entrained flow coal gasifier”, FUEL, Vol. 85, 2006, pp. 1935-1943.
- 8) 송지훈, 강민웅, 서동균, 임성진, 백민수, 황정호, “300MW급 Shell형 1단 분류층 석탄 가스화기의 전산수치해석”, 한국수소 및 신에너지학회 논문집, 제21권 제3호, 2010, pp. 227-240.
- 9) M. Hijiriyama, A. Kitahara and S. Nishida, “The Dependence of Coal Properties on Heat Consumption for Carbonization”, 1985 Proceedings - 17th Biennial Conference Held at University of Kentucky, Lexington, Kentucky, June 16~21, 1985, pp. 143-144.