

분류층 석탄 가스화 전산 고찰

조석연 · 서경원

아주대학교 화학 · 생물공학부

Computational Investigation on in a Entrained-bed Coal Gasifier

Seok Yeon Cho and Kyung Won Seo

School of Chemical Engineering and Biotechnology, Ajou University

요 약

분류층 석탄 가스화기에서 5 종류(Lewis- Stockton, Utah, Illinois #6 등의 역청탄, Usibelli 아역청탄, Beulah-Zap갈탄)의 석탄을 가스화시킬 때 산소/석탄과 수증기/석탄 비의 변화가 반응성 흐름에 미치는 영향을 평가하기 위한 전산모사를 수행하였다. 산소/석탄의 비(kg/kg)를 0.7에서 1.4로, 수증기/석탄의 비(kg/kg)를 0.0에서 0.4로 각각 변화시키면서 생성가스인 CO와 H₂의 농도 변화를 계산하였다. 또한 Roto탄을 가스화하였을 때 가스화기 출구에서의 CO와 H₂의 실험값과 전산모사 예측값을 서로 비교·분석하여 모사결과의 타당성을 입증하였다. 모사결과 탄종에 관계없이 산소/석탄의 비가 증가함에 따라 CO와 H₂의 생성량은 증가한 후 감소하였으며, 수증기/석탄의 비가 증가함에 따라 CO의 생성량은 감소하였으나 수소의 생성량은 어느 정도까지는 증가하였다. 산소/석탄의 비가 1.0~1.2이고 수증기/석탄의 비가 0.3~0.4인 범위내에서 냉가스 효율이 높게 예측되었다.

Abstract— Numerical computations were performed for the gasification of five different coals such as Lewis-Stockton bituminous, Utah bituminous, Illinois #6 bituminous, Usibelli sub-bituminous and Beulah-Zap lignite, to assess the effect of variation in oxygen to coal ratio and steam to coal ratio on reactive flow fields within an axisymmetric, entrained-flow gasifier. The concentrations of major products, CO and H₂, were calculated with varying oxygen to coal ratio(0.7~1.4) and steam to coal ratio. To verify the validity of predictions, the predicted and the measured values of CO and H₂ concentrations at the exit of the gasifier were compared for Roto coal. Reasonable agreement was obtained between the predicted and measured values. Predictions showed that the (CO+H₂) concentration increased gradually to its maximum value with increasing oxygen-coal ratio, and CO concentration decreased, but H₂ concentration increased to some extent with increasing steam-coal ratio. When the oxygen-coal ratio was between 1.0 and 1.2, and the steam-coal ratio was between 0.3 and 0.4, high values of the cold-gas efficiency were obtained.

1. 서 론

분류층 석탄 가스화기에서는 1차 주입구를 통하여 미분탄과 수송가스가 주입되며, 2차 주입구로는 기상의 산소와 수증기가 주입되는 것이 보편적이다. 이러한 방법은 두 흐름들을 빠르게 혼합시켜 안정된 확산불꽃이 형성되도록 만들어 준다. 한편 가스화 반응에서는 공기 대신 산소가 사용되며 주요 생성가스(CO와 H₂)의 생성

량을 최대로 하기 위해 주입되는 석탄과 산소의 상대적 인 양이 조절된다. 또한 수증기는 수소의 생성량을 늘리고 가스화기내 가스온도를 조절하기 위해 첨가된다. 그러므로 최적의 운전조건을 찾기 위해서는 석탄에 대한 산소 또는 수증기의 주입량 변화가 생성가스 CO, H₂ 등의 조성변화 및 냉가스효율 변화에 미치는 영향을 조사하는 것이 반드시 필요하다.

가스화기내로 주입된 석탄은 주변의 가스와 섞이거나

반응하여 복잡한 물리·화학적 메카니즘과 난류성 거동을 보이기 때문에 가스화기내의 반응성 유동장을 정확히 예측하기가 매우 어렵다. 즉 미분탄의 연소 또는 가스화를 전산모사하기 위해서는 기체·고체상의 난류 유체역학, 화학반응, 물질전달 및 복사열전달이 함께 고려된 수치모델이 필요하다.

현재까지 대표적으로 알려진 미분탄 연소와 가스화 모델링을 위한 컴퓨터 코드로 미국 Brigham Young University (PCGC-2)와 Imperial College에서 각각 개발한 프로그램이 있으며 그 외의 많은 연구자들¹⁴⁾이 미분탄의 연소 또는 가스화에 대한 해석용 프로그램을 개발하고 있다.

본 연구에서는 산소/석탄의 비 혹은 수증기/석탄의 비를 변화시킨 조업에서 탄종이 서로 다를 때 가스화기 출구에서 생성가스(CO, CO₂, H₂)의 평균조성과 냉가스 효율의 변화를 고찰하기 위해 전산모사를 수행하였으며, 모사결과에 대한 분석 및 토론을 근거로 분류층 가

스화기내 가스화 반응의 특성을 파악하였다.

2. 수치모델 및 모사^{4,6)}

2-1. 수치모델 및 모사

본 연구에서는 Fig. 1에서 보인 것과 같은 실린더형 가스화기를 반경방향과 축방향으로 37×100의 격자로 나누어 2차원 축대칭으로 전산모사를 하였다. 이 전산

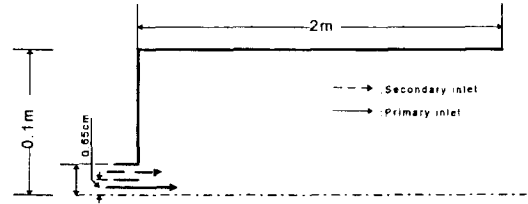


Fig. 1. Schematic diagram of a coal gasifier⁶⁾.

Table 1. Gas phase conservation equations for the gas-particle/gas-droplet Eulerian reference frame⁵⁾.

ϕ	D_ϕ	
		$\frac{\partial}{\partial x}(\tilde{\rho} u \phi) + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r}(r \tilde{\rho} \phi) - \frac{\partial}{\partial x} - \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r}(r D_\phi \partial \phi / \partial r) = S_\phi$
\tilde{u}	μ_c	$-\frac{\partial \bar{p}}{\partial x} + \frac{\partial}{\partial x}(\frac{\mu_c \partial \tilde{u}}{\partial x}) + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r}(r \mu_c (\partial \tilde{v} / \partial r)) + S_p^u + \tilde{u} S_p^m$
\tilde{v}	μ_c	$-\frac{\partial \bar{p}}{\partial r} + \frac{\partial}{\partial x}(\frac{\mu_c \partial \tilde{u}}{\partial x}) + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r}(r \mu_c (\partial \tilde{v} / \partial r)) - \frac{2 \mu_c \tilde{v}}{r^2} + \frac{\tilde{\rho} \tilde{w} \tilde{w}}{r} + S_p^v + \tilde{v} S_p^m$
\tilde{W}	μ_c	$-\frac{\tilde{\rho} \tilde{v} \tilde{w}}{r} - \frac{\tilde{w}}{r^2} \frac{\partial}{\partial r}(r \mu_c)$
κ	μ_c / σ_κ	$\Phi - \bar{\rho} \epsilon$
ϵ	μ_c / σ_ϵ	$(\epsilon / k)(C_q \Phi - C_\epsilon \bar{\rho} \epsilon)$
\tilde{f}_p	μ_c / σ_f	0
g_f	μ_c / σ_g	$C_{g1} \mu_c [(\frac{\partial \tilde{f}}{\partial x})^2 + (\frac{\partial \tilde{f}}{\partial r})^2] - \frac{C_{g2} \bar{\rho} \epsilon g_\mu}{k}$
$\tilde{\eta}_p$	μ_c / σ_η	S_p^m
g_η	μ_c / σ_g	$C_{g1} \mu_c [(\frac{\partial \tilde{\eta}}{\partial x})^2 + (\frac{\partial \tilde{\eta}}{\partial r})^2] - \frac{C_{g2} \bar{\rho} \epsilon g_\eta}{k}$
\tilde{h}	μ_c / σ_h	$q_{vg} + \tilde{u} (\partial \bar{p} / \partial x) + \tilde{v} (\partial \bar{p} / \partial r) + S_p^h + \tilde{h} S_p^m$
		where
		$\Phi = 2 \mu_2 [(\frac{\partial \tilde{u}}{\partial x})^2 + (\frac{\partial \tilde{v}}{\partial r})^2 + (\frac{\tilde{v}}{r})^2] + (\frac{\partial \tilde{u}}{\partial r} + \frac{\partial \tilde{v}}{\partial x})^2 + [r \frac{\partial}{\partial r}(\frac{\tilde{w}}{r})]^2 + (\frac{\partial \tilde{w}}{\partial r})^2$
		$\mu_c = \mu_0 + \mu_1$
		$\mu^i = C_\mu \bar{\rho} k^2 / \epsilon$

모사를 위해서 BYU(Brigham Young University)에서 개발한 PCGC-2(93)⁹⁾을 사용하였다. PCGC-2(93)는 가스상의 기본 편미분방정식을 유한차분적분법으로 바꿔서 해를 구하는 TEACH CODE⁹⁾를 기본으로 하였으며, 여기에 압력장 계산을 위하여 SIMPLER(Semi-Implicit Method for Pressure-Linked Equations, Revised) 알고리즘⁹⁾과 미세입자계와 기상계를 연결하기 위하여 PSI-Cell(Particle Source-In-Cell)법⁹⁾이 포함되어 있다.

또한 PCGC-2(93)는 미분탄의 연소 및 가스화 반응과 가스화기 내에서의 기체-고체, 기체-기체간의 반응성 흐름 및 비반응성 흐름의 2차원 정상상태 모델을 기본적인 수치모델로 하며, 기상에 대해서는 Eulerian계 해석법을 그리고 입자상에 대해서는 Eulerian계와 Lagrangian계의 혼합 해석법을 모델화하여 난류성 화염내의 난류 유체역학과 난류 연소과정을 해석하기 위한 전산 코드이다.

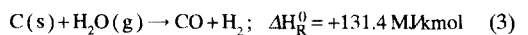
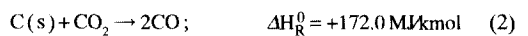
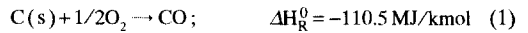
이 프로그램에서 기상반응은 혼합분율을 근거로 하는 통계적 확률밀도 함수를 이용하여 기상의 연소를 모델화하였는데 이는 대부분의 기상반응이 혼합속도에 의해 율속되기 때문이다. 기상에 대해서는 (κ-ε)의 두 난류에 관한 식들이 사용되었고, 입자상에서는 공기역학적 입자 항력과 난류성 입자분산의 영향이 적용되었다. 입자들과 주변 기체와의 반응속도는 입자주변의 기

체간 난류 혼합속도에 비해 느린 것으로 가정되었으며 석탄의 탈휘발화, 좌의 반응에 대한 속도는 시평균 물성(time average property)들로 부터 계산되었다. 한편 비등방성이고 다중 산란인 입자와 기체의 복사 열전달도 모델에 포함되었다. 이러한 기상과 입자계의 지배방정식은 Table 1에 제시한 바와 같으며 이 지배방정식과 석탄의 반응모델 및 복사 열전달 모델등은 Smoot 등⁹⁾의 자료에 자세히 설명되어 있다. 한편 원하는 해를 얻기 위한 알고리즘은 Fig. 2에 보인 바와 같으며 이에 대한 자세한 설명은 조와 서^{6,10)}의 참고문헌에 언급되어 있다.

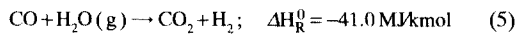
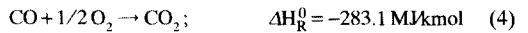
2-2. 석탄 가스화 반응

본 연구에서 모델화한 주요 가스화 총괄반응은 다음과 같다¹¹⁾.

비균일 반응



주요 기상반응



C(s)와 산소가 반응하여 CO가 생성되며(반응 1) CO는 기상내의 자유산소(free oxygen)와 반응하여 CO₂로 전환(반응 4)된다. 그러나 높은 온도에서는 미 반응으로 남은 C(s)가 CO₂와 반응(반응 2)하여 CO가 생성된다.

첨가된 수증기와 석탄 좌가 반응(반응 3)하여 발열량이 높은 수소가 생성되는데 이 때 주위로부터 에너지를 흡수하기 때문에 주위의 온도가 떨어진다.

석탄/수증기/산소계에서는 반응 (4)에 의해 O₂와 CO가 빨리 소모되며 이 때 열이 발생하여 생성가스의 온도가 증가하고 C(s)와 CO₂의 비균일 반응(반응 2)이 촉진된다. 수증기-기체 변환반응(shift reaction) (반응 5)에 의해 CO가 CO₂로 전환된다. 지금까지의 비균일 반응과 기상반응들에 대한 반응모델은 Smoot 등⁹⁾의 자료에 자세히 제시되어 있다.

3. 모사 결과 및 고찰

3-1. 실험결과와 비교분석

모사결과와 타당성을 입증하기 위하여 이 등¹²⁾이 DTR(Drop Tube Reactor, 직경 5 cm, 길이 1 m, 1,500°C)을 이용하여 얻은 Roto탄에 대한 가스화 실험결과를 동

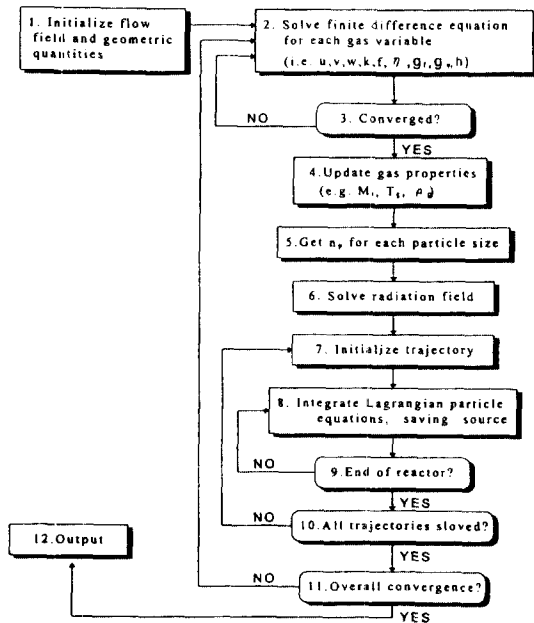
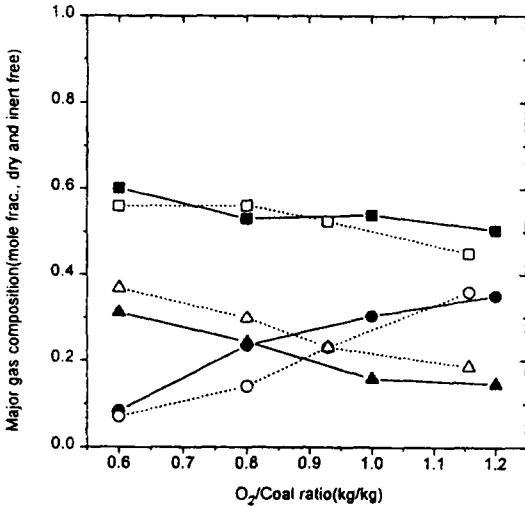


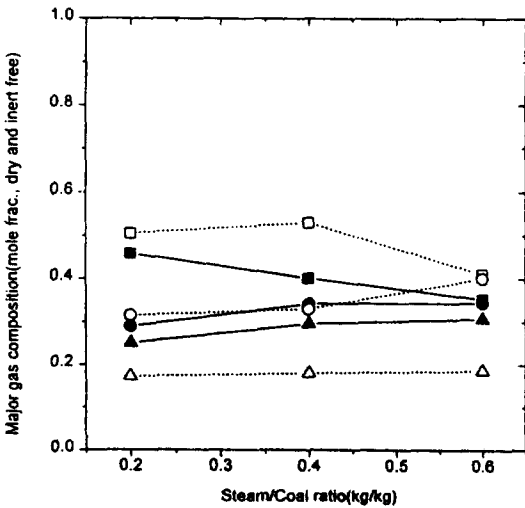
Fig. 2. Information flow for simulation⁶⁾. (a) the effects of O₂/coal ratio on product gas composition. (b) the effects of steam/coal ratio on product gas composition.

일한 조건에서 상기의 PCGC-2(93)로 예측한 결과와 비교해 보았다. Fig. 3의 (a)와 (b)는 각각 산소/석탄의 비를 0.6~1.2, 수증기/석탄의 비를 0.2~0.6까지 변화시켜 Roto탄을 가스화시켰을 때의 결과를 도시한 그림이다. 그림 (a)에 도시한 실험결과와 예측한 결과에서 볼 수 있듯이 산소/석탄의 비가 증가함에 따라 CO₂의 몰분율은 지속적으로 증가하고 CO와 H₂의 몰분율은 감소하는 경향이 비교적 서로 일치함을 알 수 있다. 그러나 그림

(b)에 보인 실험결과와 예측한 결과는 수증기/석탄의 비가 증가함에 따라 H₂와 CO₂의 농도는 증가하고 CO의 농도가 감소하는 경향을 보임으로써 서로 간에 다소의 차이가 있음을 알 수 있었다. 즉 수증기/석탄의 비가 증가할 때 실제 석탄의 회분내에 존재하는 금속성분(철분 등)이 촉매로써 석탄 최-수증기의 반응을 활성화¹²⁾시킴과 더불어 반응기의 상부, 하부 온도분포 차이로 반응(2)가 더 활성화됨으로 인해 CO의 몰분율에 대한 실험값이 예측값보다 높았으며 상대적으로 H₂의 몰분율이 낮게 예측되었다.



(a) the effects of O₂/coal ratio on product gas composition.



(b) the effects of steam/coal ratio on product gas composition

Fig. 3. Comparison of between PCGC-2(93) predictions and experimental data(ref[12]) for Roto subbituminous coal. PCGC-2(93) predictions(CO: -■-, CO₂: -●-, H₂: -▲-) and experimental data(CO: ··■··, CO₂: ··●··, H₂: ··▲··).

3-2. 모사결과 및 토론

3-2-1. 모사조건

본 연구에서는 5 종류의 석탄(Lewis-Stockton, Utah, Illinois #6 등의 역청탄, Usibelli 아역청탄, Beulah-Zap 갈탄)을 사용하였으며 이들 석탄에 대한 공업분석과 원소분석의 결과를 Table 2에 보였다. 또한 반응기의 크기, 각 흐름의 유속, 기체·고체입자의 물리적 성질과 기체·고체의 유입비율등의 모사조건을 Table 3에 제시하였다.

본 모사를 위해 가스화기의 1차 주입구로 미분탄을 질소가스와 함께 주입시켰으며 2차 주입구를 통해 산소와 수증기를 주입시켰다. 이 때 미분탄의 선속도는 유체

Table 2. Properties of coal used⁵⁾.

Coal	Lewis-Stockton Utah bituminous	Illinois #6 bituminous	Alaska Usibelli sub-bit.*	Beulah-Zap lignite	
Proximate Analysis (dry basis, wt%)					
Ash	19.84	4.71	15.48	12.2	9.72
Volatiles	30.17	45.84	40.05	51.0	44.94
Fixed Carbon	49.99	49.45	44.47	36.8	45.34
High Heating Value (MJ/kg, dry)**	-	29.8	27.4	26.2	-
Elemental Analysis (daf, wt%)					
C	82.69	80.71	77.72	75.40	72.97
H	5.26	5.76	5.00	5.66	4.83
O	9.84	11.59	13.53	18.01	20.35
N	1.56	1.57	1.37	0.615	1.15
S	0.65	0.37	2.38	0.308	0.7

*ref.¹³⁾
**ref.^{14,15)}

Table 3. Summary of test conditions performed.

Feed Rates	primary gas(kg/h)	4.0		
	secondary gas(kg/h)	14.6~21.0		
	oxygen/coal (kg/kg)	0.7~1.4		
	steam/coal(kg/kg)	0.0~0.4		
Inlet Gas Properties	primary	swirl number	0.0	
		turbulent intensity	0.1	
		temperature(K)	356.0	
		mole fraction(N ₂)	1.0	
	secondary	swirl number	0.0	
		turbulent intensity	0.1	
		temperature(K)	589.0	
		mole fraction	Oxygen	0.56~1.0
			Steam	0.0~0.44
		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(K)	1100.0		
	particle solid density(kg/m ³)	1340.0		
Ccal Particle Parameters	mass fraction of particle types	5 μm	0.2	
		13 μm		
		32 μm		
		50 μm		
		100 μm		
Computational Grid		37×100		

와 동일한 선속도로 유입되는 것으로 가정하였다. 이하 본문에서는 산소/석탄의 비를 OR로 수증기/석탄의 비를 SR로 각각 정의하여 사용하고자 한다.

3-2-2. 산소/석탄의 비(OR)에 따른 영향

석탄은 1차 주입구를 통해 10.4 kg/h에서 20.9 kg/h의 질량유속으로 주입되었으며 수증기와 산소는 2차 주입구를 통해 0.67 kg/h, 14.6 kg/h의 질량유속으로 각각 주입되었다. 이 조건하에서 OR을 0.7에서 1.4의 범위내로 변화시켜 석탄 가스화 모사를 수행하였다. 이 때 5 종류의 석탄을 가스화시켰을 때 생성가스의 유출농도 및 냉가스 효율의 예측값을 Fig. 4와 Fig. 5에 각각 도시하여 비교하였다.

Fig. 4에는 가스화기 출구에서 각 생성가스(CO, CO₂, H₂)의 평균 물분율(inert free, dry basis)을 도시하였다. Fig. 4에서 볼 수 있듯이 탄종에 관계없이 OR이 증가함

에 따라 주요 생성물 CO와 H₂의 물분율은 증가후 감소하였다. 이는 OR이 커질수록 산소와 석탄의 휘발분 또는 석탄 촉의 반응에 의해 높은 산화열이 발생됨으로 인해 석탄 촉-CO₂ 또는 석탄 촉-H₂O의 흡열반응이 촉진되기 때문에 초기에 CO와 H₂의 생성량이 증가하였다. 그러나 OR이 계속 증가하여 산소의 적정량을 초과하게 되면 산소가 빠르게 많은 양의 석탄 촉와 반응함으로써 CO₂ 또는 H₂O와 반응하는 석탄 촉의 양이 적어져 CO와 H₂의 생성량이 감소하게 되며 또한 산소와 생성가스 CO, H₂의 반응에 의해서도 CO와 H₂의 생성량이 감소하게 된다. 또한 Lewis-Stockton, Utah, Illinois #6의 역청탄, Usibelli 아역청탄, Beulah-Zap 갈탄등에 대한 OR이 각각 1.0, 1.2, 1.2, 1.0와 0.9일 때 CO와 H₂의 물분율이 가장 높음을 각 그림에서 볼 수 있다.

한편, 석탄 등급(역청탄, 아역청탄, 갈탄)에 대해 OR이 변화함에 따라 가스화에 미치는 영향을 살펴보면 고정탄소를 많이 포함하고 있는 역청탄(그림 a, b, c)에 대해 최적의 OR은 1.0~1.2의 범위였으며 휘발분(수분 포함)을 많이 포함한 아역청탄과 갈탄에 대한 최적의 OR은 0.9~1.0의 범위였다. 이는 Table 2에 제시한 것처럼 역청탄이 아역청탄과 갈탄에 비해 고정탄소를 더 많이 포함하고 있어 더 많은 산소가 요구되기 때문이다. 이로 인해 아역청탄과 갈탄에 비해 역청탄을 사용할 경우 최적의 OR은 더 높게 예측되었다.

Fig. 5는 Utah 및 Illinois #6 등의 역청탄과 Usibelli 아역청탄의 OR값이 변화함에 따른 냉가스 효율의 변화를 도시한 그림이다. 냉가스 효율은 실온에 있는 생성가스의 발열량 대 석탄의 발열량(daf) 비로 정의된다. 모사결과, 주요 생성가스의 유출 평균 물분율이 높을 때 냉가스 효율이 높음을 확인할 수 있었다. Utah 및 Illinois #6의 역청탄을 사용하여 예측한 냉가스 효율은 OR이 1.2일 때 각각 74.6과 76.8%로 가장 높았으며, Usibelli 아역청탄을 사용할 경우에는 OR이 1.0일 때 70.7%로 가장 높았다. Table 4에 제시한 자료에서 볼 수 있듯이 석탄내에 고정탄소를 많이 함유할수록 최대 냉가스 효율을 보이는 OR이 더 커졌다. 한편 고정탄소에 대한 휘발분의 비가 커질수록 최대 냉가스 효율은 낮아짐을 알 수 있는데 이는 O₂, H₂O와 CO₂가 고정탄소와 반응할 기회가 적어져 생성가스(CO, H₂)의 생성량이 상대적으로 줄어들었기 때문이다.

3-2-3. 수증기/석탄의 비(SR)에 따른 영향

분류층 가스화 공정의 반응물로 수증기가 사용되기 때문에 석탄 가스화를 명백히 이해하기 위해서는 수증기의 역할을 예측하는 것이 필요하다. 이를 위해 수증기와 석탄의 질량비(SR)를 0.0~0.4 범위내에서 변화시켜 주요 생성가스의 유출농도와 냉가스 효율의 변화를 모사·고

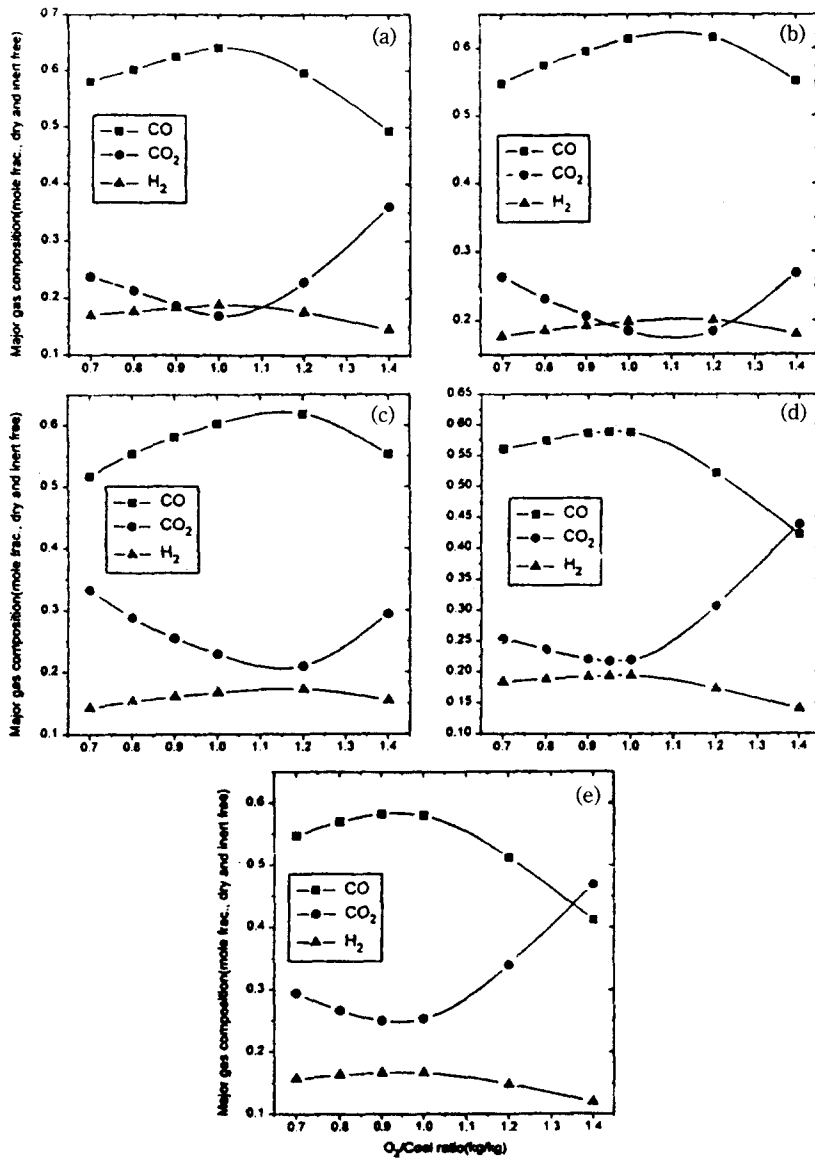


Fig. 4. Predicted major gas compositions with respect to the variation of O₂-coal ratio (a: Lewis-Stockton bit., b: Utah bit., c: Illinois #6 bit., d: Usibelli subbit., e: Beulah-Zap lig.)

Table 4. The relation of fixed carbon and volatiles with the maximum efficiency of cold gas.

Coals	Fixed carbon(a)	Volatiles (b)	(b)/(a)	O ₂ /Coal ratio	
				max. efficiency of cold gas (O ₂ /Coal ratio)	max. efficiency of cold gas (Steam/Coal ratio)
Utah bit.	49.5	45.8	0.93	74.6 (1.2)	81.5 (0.3)
Illinois #6 bit.	44.5	40.1	0.90	76.8 (1.2)	83.4 (0.3)
Usibelli subbit.	36.8	51.0	1.39	70.7 (1.0)	74.2 (0.2)

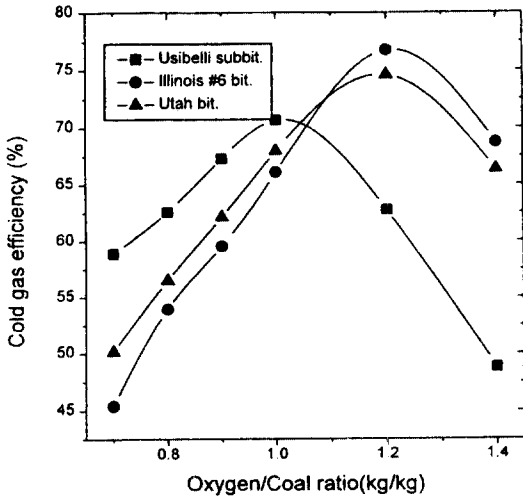


Fig. 5. Predicted cold gas efficiency versus O₂-coal ratio.

찰하였다. 1차 주입구로 석탄이 질량유속 16.0 kg/h로 주입되었으며 2차 주입구로는 산소와 수증기가 함께 주입되었다. 이 때 산소의 질량유속은 14.6 kg/h로 하였으며 수증기의 질량유속은 0.0에서 6.4 kg/h사이로 하였다.

SR을 변화시켜 5 종류(Lewis-Stockton, Utah, Illinois #6 등의 역청탄, Alaska Usibelli 아역청탄, Beulah-Zap 갈탄)의 석탄을 가스화시켰을 때 가스화기 출구에서 생성가스의 평균조성 변화를 각각 Fig. 6에 도시하였다. SR이 커질수록 CO의 몰분율은 감소하고 H₂와 CO₂의 몰분율은 증가하였는데 이는 SR이 커질수록 석탄 화수증기의 흡열반응(반응 3)과 수증기-가스의 변환반응(반응 5)이 촉진되기 때문이다.

SR을 0.0에서 0.4까지 변화시키면서 역청탄(Lewis-Stockton, Utah, Illinois #6)을 가스화시켰을 때 가스화기 출구에서 CO의 평균 몰분율은 0.63에서 0.32까지 감소하였으며 H₂는 0.14에서 0.33로, CO₂는 0.2에서 0.35까지 증가하였다. 또한 아역청탄(Usibelli)과 갈탄(Beulah-Zap)에 대한 CO의 평균 몰분율은 0.61에서 0.23까지 감소하였으며 H₂는 0.14에서 0.29로, CO₂는 0.22에서 0.49로 증가하였다.

Fig. 6을 고찰하면 다음과 같은 결과를 얻을 수 있다. 동일한 SR에서 역청탄, 아역청탄, 갈탄에 대한 CO 및 H₂의 몰분율은 역청탄일 때가 높게 예측되었고, CO₂의 몰분율은 아역청탄과 갈탄일 때가 높게 예측되었다. 즉 역청탄의 가스화에 있어서 역청탄이 아역청탄과 갈탄에 비해 휘발성분이 낮기 때문에 가스화기 상단에서 휘발분과 산화반응하고 남은 산소는 가스화기 중·하단에서 지속적으로 석탄 화와 산화반응(반응 1)하며 이 때문에 가스의 온도가 올라가게 되며 결국, 가스화기

중·하단의 온도가 상승하여 석탄 화-O₂ 또는 석탄 화-수증기의 반응(반응 2, 3)이 촉진되어 CO와 H₂의 생성량이 증가하는 것이다. 반면에 아역청탄과 갈탄을 가스화시켰을 때는 다량의 휘발분이 산소와 반응하여 CO₂가 생성되기 때문에 유출되는 CO₂의 평균 몰분율이 높아졌다.

Fig. 7에 도시한 그림은 SR의 변화에 따른 Utah, Illinois #6 등의 역청탄과 Usibelli 아역청탄에 대한 냉가스 효율의 변화를 도시한 결과이다. Utah역청탄에 대해 SR이 0.25일 때 81.5%, Illinois #6 역청탄인 경우에는 SR이 0.3일 때 83.5%로, 그리고 아역청탄인 Usibelli 탄은 SR이 0.2일 때 74%로 각각 최대의 냉가스 효율을 보였다. 즉 적절한 SR까지는 수증기 유입량이 증가할수록 생성물중 발열량이 높은 수소의 생성량이 증가하여 냉가스 효율이 증가하는 것이지만 SR이 더욱 커지면 수증기-가스의 변환반응(반응 5)에 의해 CO의 생성량이 감소하며, 수증기 유입량의 증가로 가스화기내 가스온도가 낮아짐에 따라 수소의 생성량이 더 이상 증가하지 않기 때문에 냉가스 효율이 감소하게 되는 것이다.

3-2-4. 두 인자(OR과 SR)에 따른 영향

Table 2에 제시한 석탄 중 Usibelli 아역청탄을 사용하여 OR을 0.7에서 1.4까지, SR을 0.0에서 0.4까지 변화시켜 가스화시켰을 때 가스화기 출구에서 생성가스, CO, H₂의 평균 몰분율과 냉가스 효율의 변화를 Fig. 8~10에 3차원 그래프로 도시하였다.

Fig. 8에는 가스화기 출구에서 CO의 평균 몰분율의 변화를 도시하였다. 그림에서 볼 수 있듯이 OR과 SR의 낮은 구간에서 CO의 몰분율은 높았는데 이는 OR이 낮은 경우 산소가 많은 양의 석탄으로부터 방출된 휘발분 또는 석탄 화와 반응하여 CO₂ 또는 CO가 생성되며 이들 생성가스중 CO₂는 석탄 화와 반응(반응 2)하여 CO가 많이 생성되기 때문이다. 또한 생성된 CO를 다시 산화시킬 수 있는 미반응한 산소의 양이 적어져 CO의 몰분율이 높아지는 것이다. 그러나 이 조건하에서 SR이 점차 증가하면 수증기-가스 변환반응(5)에 의해 CO가 CO₂로 전환되기 때문에 CO의 몰분율이 급격히 감소하였다. 결국 OR이 0.9~1.0과 SR이 0.05~0.1 범위내에서 CO의 몰분율이 가장 높음을 알 수 있다.

Fig. 9에는 가스화기 출구에서 생성가스중 수소의 평균 몰분율의 변화를 도시하였다. OR이 증가할수록 수소의 몰분율은 감소하였는데 이는 과잉의 산소가 석탄 화-수증기 반응으로 생성된 수소를 소모시키기 때문이다. SR이 증가할 경우에 수증기-석탄 화의 반응(반응 3)에 의해 수소의 몰분율이 증가되었으나 SR이 계속 증가할 경우에는 반응온도가 낮아짐"으로 인해 수소의 생

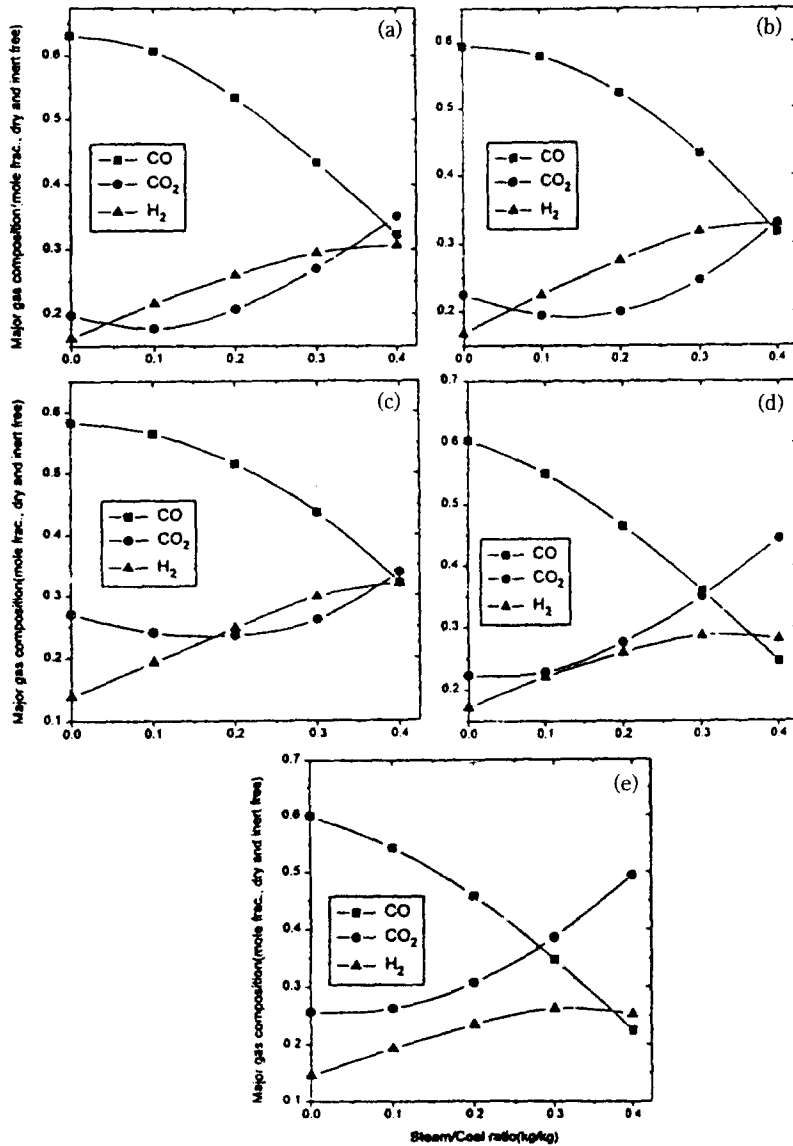


Fig. 6. Predicted major gas compositions with respect to the variation of steam-coal ratio (a: Lewis-Stockton bit., b: Utah bit., c: Illinois #6 bit., d: Usibelli subbit., e: Beulah-Zap lig.)

성속도가 낮아져 수소의 물분율은 감소하였다. 결국 OR이 0.7~0.9와 SR이 0.1~0.3 범위내에서 수소의 물분율이 높음을 알 수 있다.

Fig. 10은 OR과 SR의 변화에 대한 냉가스 효율의 변화를 도시한 그림이다. 그림에서 볼 수 있듯이 OR이 0.8~0.9이고 SR이 0.2~0.3인 범위내에서는 CO의 물분율이 높음으로 인하여 냉가스 효율이 높았으며 OR이 1.0~1.2이고 SR이 0.3~0.4인 범위내에서는 H₂의 조성이 높음으로 인하여 냉가스 효율이 높아졌다.

4. 결 론

분류층 석탄 가스화기 내의 반응성 유동장을 고찰하기 위하여 전산모사를 수행하였으며 다음과 같이 그 결과를 요약할 수 있다.

- 1) 산소/석탄의 비 또는 수증기/석탄의 비를 변화시켜 5 종류의 석탄(Lewis-Stockton, Utah, Illinois #6 등의 역청탄, Usibelli 아역청탄, Beulah-Zap갈탄)을 가스화시켰을 때 가스화기 출구에서 생성가스의 농도와 냉가스 효

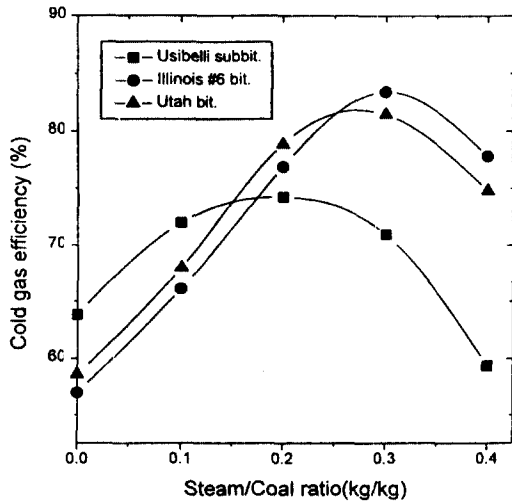


Fig. 7. Predicted cold gas efficiency versus steam-coal ratio.

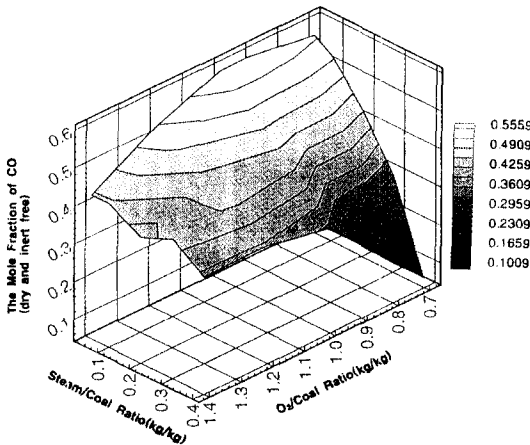


Fig. 8. Response-surface of CO for Usibelli subbituminous coal.

율의 변화를 고찰하였다.

2) 본 모사결과에 대한 타당성을 입증하기 위하여 이 등¹²⁾이 DTR을 이용하여 얻은 Roto탄에 대한 가스화 실험결과와 동일한 조건에서 상기의 PCGC-2(93)로 예측한 결과를 서로 비교·분석함으로써 예측결과와 실험결과가 비교적 일치함을 확인하였다.

3) 역청탄으로부터 CO와 H₂의 생성량을 증가시키기 위해서는 아역청탄과 갈탄에 비해 상대적으로 많은 양의 산소가 필요함을 알 수 있는데 이는 역청탄이 고정탄소의 양이 많기 때문이다.

4) 최적의 냉가스 효율을 얻기 위해서는 산소/석탄과 수증기/석탄 비를 적절히 조절해야 하며, 이들은 탄종에

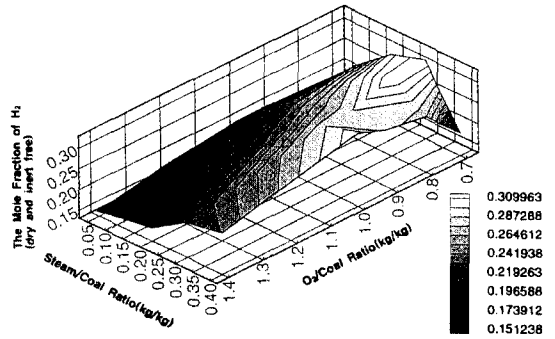


Fig. 9. Response-surface of H₂ for Usibelli subbituminous coal.

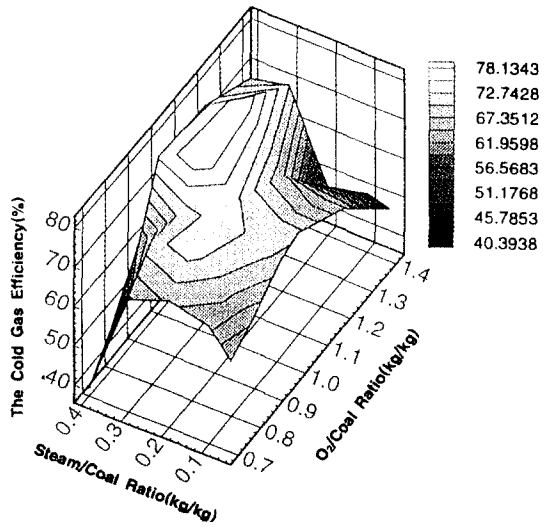


Fig. 10. Response-surface of cold gas efficiency for Usibelli subbituminous coal.

따라 다소 차이가 있음을 알 수 있었다.

사용기호

- x, r : axial radial coordinate
- \tilde{u} : favre average axial velocity, m/s
- \tilde{v} : favre average radial velocity, m/s
- \tilde{u} : favre average tangential velocity, m/s
- $\bar{\rho}$: reynolds average density, kg/m³
- μ_c : effective viscosity, kg/m · s
- μ_t : turbulent viscosity, kg/m · s
- μ_l : laminar viscosity, kg/m · s
- $C_{k_1}, C_1, C_2, \sigma_k, \sigma_\epsilon$: turbulence model constansts
- $C_{g_1}, C_{g_2}, \sigma_s, \sigma_g, \sigma_b$: turbulent combustion model con

stansts
 g'_r : the net volumetric heat addition due to radiation, kW/m³
 k : turbulent kinetic energy, m²/s²
 ϵ : dissipation rate of turbulence energy, m²/s
 f : mixture fraction
 \tilde{f}_p : favre-average mixture fraction corrected for h
 g_r : variance of the mixture fraction
 $\tilde{\mu}$: favre-average coal gas mixture fraction
 \tilde{h} : faver-average enthalpy, J/kg
 S_p^u, S_p^v : aerodynamic drag effects of the particle on the axial and radial components of momentum
 S_p^m : net rate of mass addition per unit volume due to particle reaction
 g : gas
 p : particle

감사의 글

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

참고문헌

- Smoot, L.D. and Brown, B.W.: "Controlling Mechanisms in Gasification of Pulverized Coal", *J. Fuel*, **66**, pp.1240-1256 (1987).
- 이진욱, 윤용승: "석탄 가스화기내의 기체-고체 이상유동장에 대한 수치해석 연구", 한국에너지공학회지, Vol.4, No.3, pp.331-337 (1995).
- 이선경, 나혜령, 장동순, 정진도, 지평삼: 한국에너지공학회지, **4**(1), 23 (1995).
- 이경욱, 서경원, 최병선: 한국에너지공학회지, **1**(1), 76 (1992).
- 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).
- 조석연, 서경원: "석탄입자의 크기가 가스화에 미치는 영향에 관한 연구", 한국에너지공학회지, **6**(1), 77 (1997).
- Gosman, A.D. and Pun, W.M.: "Lecture Notes for Course Entitled", Calculation of Recirculating Flow", Imperial College, London (1973).
- Patankar, S.V.: "Numerical Heat Transfer and Fluid Flow", McGraw-Hill, New York (1980).
- Crowe, C.T., Sharma, M.P. and Stock, D.E.: *Trans. ASME, J. Fluids Eng.*, **99**, 325 (1977).
- 조석연, 서경원: "석탄 가스화기내의 유동장 특성 연구", 한국에너지공학회지, **6**(1), 58 (1997).
- Smoot, L.D. and Smith, P.J.: "Coal Combustion and Gasification", Plenum Press, New York (1985).
- 이재구 외 5, "Drop Tube Reactor를 이용한 분류층 석탄가스화 특성 연구", *HWAHAK KONGHAK*, **34**(4), pp.496-501, 1996.
- 석탄가스화 복합사이클 발전시스템 실용화 개발(II) 년차 보고서, 상공자원 부 (1994).
- Brown, B.W., Smoot, L.D., Smith, P.J. and Hedman, P.O.: "Measurement and Prediction of Entrained-Flow Gasification Process", *J. AIChE*, **34**(3), 435 (1988).
- Brown, B.W., Smoot, L.D. Smith, P.J. and Hedman, P.O.: "Effect of Coal Type on Entrained Gasification", *J. Fuel*, **65**, pp.673-678, 1986.
- Azuhata, S., Hedman, P.O. and Smoot, L.D.: "Carbon Conversion in an Atmospheric-Pressure Entrained Coal Gasifier", *J. Fuel*, **65**, pp.212-217, 1986.
- 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).
- Launder, B.E. and Spalding, D.B.: "Mathematical Models of Turbulence", Academic Press, London (1972).
- Roache, P.J.: "Computational Fluid Dynamics", Hermosa Publishers, Albuquerque, NM (1976).
- Badzioch, S. and Hawksley, P.G.W.: "Kinetics of Thermal Decomposition of Pulverized Coal Particles", *IEC Proc. Des. Dev.*, **9**, 521 (1970).
- Sunavala, P.D.: *J. Institute of Fuel*, **41**, 477 (1968).
- Thurgood, J.R.: "Mixing and Combustion of Pulverized Coal", Ph.D. Dissertation, Brigham Young University (1979).