



## 지중 석탄가스화 공정 시뮬레이션을 통한 산화제 주입조건에 따른 합성가스 특성에 대한 연구

장동하 · 윤상필 · <sup>†</sup>김형택 · 김정규\* · 조원준\* · 주우성\* · 이진욱\*\* · 이찬\*\*\*  
아주대학교 에너지시스템학과, \*한국가스공사, \*\*고등기술연구원, \*\*\*수원대학교  
(2013년 6월 8일 접수, 2013년 8월 13일 수정, 2013년 8월 22일 채택)

## The Study on Synthesis Gas Characteristics Following Different Injection Condition of Oxidizing Agent Through Simulation of Underground Coal Gasification

Dong-Ha Jang · Sang-Phil Yoon · <sup>†</sup>Hyung-Taek Kim · Jeong-Gyoo Kim\*  
Won-Jun Cho\* · Woo-Sung Ju\* · Jin-Wook Lee\*\* · Chan Lee\*\*\*  
Division of Energy Systems Research, Ajou University, Suwon 443-749, Korea  
<sup>\*</sup>Korea Gas Corporation, Korea  
<sup>\*\*</sup>Plant Engineering Center, Institute for Advanced Engineering, Korea  
<sup>\*\*\*</sup>Division of Mechanical Engineering, Suwon University, Korea  
(Received June 8, 2013; Revised August 13, 2013; Accepted August 22, 2013)

### 요약

에너지 보안의 위기를 타파하기 위한 가장 많은 관심을 가지고 있는 것 중 하나가 지중 속 매장되어 있는 석탄이다. 본 연구에서는 지중에서 석탄을 직접 채굴을 하지 않고 지중 내 석탄 가스화를 직접 진행할 수 있는 지중 석탄가스화 공정에 대하여 화학 반응 공정 모사를 진행하였다. 본 연구는 1980년대 말에 미국의 Rocky Mountain 1 지중 석탄가스화 프로젝트를 참고로 진행을 하여 기본 모델을 완성하였다. 그리고 산화제 주입조건에 따른 민감도 분석을 통하여 합성가스의 조성 결과를 확인하였다. 반응 모델은 건조, 열분해, 촉 가스화로 나누어 모델이 구현되었고 실제 실험값에서의 생산된 가스량, 가스화 된 탄소량, 가스 수율 등의 값으로 결과를 확인하였다.

**Abstract** - The underground coal which is buried in the ground will have a lot of attention to overcome energy crisis as an energy resources standpoint. Many studies of underground coal gasification have been also conducted because of its advantage which does not require mining. In this study, the simulation of underground coal gasification process was carried out with Aspen Plus. This study was executed by Rock Mountain 1 Underground Coal Gasification project in the United States in the late 1980s as a reference. Sensitivity analysis proceeded to investigate synthesis gas characteristics following different injection condition of oxidizing agent. The underground coal gasification model has been implemented. That is divided into drying, pyrolysis, char gasification and the simulation results was confirmed by the production gas flow, yield of synthesis gas and amount of gasified carbon from results of the actual experimental data.

**Key words** : underground coal gasification, UCG, simulation, Aspen Plus

<sup>†</sup>Corresponding author: lena0624@ajou.ac.kr

## I. 서 론

현재 여러 나라에서 지중 석탄가스화에 대하여 많은 프로젝트를 수행하고 있다. 석탄가스화에 대한 관심은 석유 자원에 대한 위기로 고조되었다. 갑작스러운 석유 가격에 대한 대체 자원으로 자원량이 풍부한 석탄에 대한 개발이 계속적으로 이루어졌고 석유의 가격 변동으로 인하여 개발과 지연, 포기 등의 상황이 반복되어 왔다. 최근 에너지 위기에 대한 인식과 석유 자원의 고갈로 인하여 석탄을 자원으로 이용하려는 기술 개발이 더욱 증가되고 있다. 이는 아직까지 태양광, 태양열, 풍력 등의 신재생 에너지로 비용적으로나 소요면에서 충당 가능한 양이 턱없이 부족하기 때문이다. 지중 석탄가스화는 공정이 단순하며 굴착 기술의 발전으로 비용적인 면에서 유리할 수 있다. 이에 탄광이 확보되고 효율적인 공정으로 운용이 가능하다면 경제적으로 유리한 플랜트가 될 수 있다. 본 연구에서는 지중 석탄가스화 공정에 대한 시뮬레이션을 진행하여 검증 후 산화제에 따른 합성가스의 특성을 알아보고 예측하는데 목표를 두고 있다. 이에 대한 연구는 미개척 탄광에서의 지중 석탄가스화 개발을 통해 전력 및 청정 연료 생산을 개발하고 예측해 보는데 하나의 도구로 활용할 수 있을 것으로 판단된다.

## II. 본 론

### 2.1. 지중 석탄가스화 모델의 기본조건

Aspen Plus를 이용한 모델에 사용할 석탄의 조성 과 운전조건을 문헌 조사를 통하여 선정하였으며 이는 본 연구에서 기본 모델로 하고자 하는 Wyoming 주의 Hanna 석탄광층에서 진행된 Rock Mountain 1 프로젝트에서의 실험 데이터를 기본으로 하였다. 문헌을 통해 제시된 석탄의 공업분석과 원소분석 값을 Table 1에 나타내었다[1].

다음으로는 기본 모델로 선정된 Rocky Mountain 1 프로젝트에서의 지중 석탄가스화 공정 시뮬레이션에 대한 입력값 및 운전조건을 선정하였다. 이에 대해서도 실제 프로젝트에서 진행된 실험값으로 선정하였고 이에 대하여 Table 2에 나타내었다[2].

### 2.2. 지중 석탄가스화 모델의 시뮬레이션 단계

지중 석탄가스화 시뮬레이션을 위한 첫 단계는 위와 같이 문헌조사를 통한 실제 데이터를 확보하는 것과 기본 모델 선정이었다. 다음 단계는 좀 더 구체적으로 지중 석탄가스화 시뮬레이션을 위한 반응속도와 반응모델에 대한 연구를 진행하였다.

먼저 Aspen Plus를 이용한 지중 석탄가스화 공정

시뮬레이션을 위하여 주입정과 석탄의 가스화가 진행되는 석탄광층, 그리고 생성된 합성가스가 나오는 생산정에 대한 이해와 모델 구현을 위한 방법이 제시되어야 한다.

석탄광층에 대한 물성치를 파악하고 석탄 cavity를 고려하여 모델을 만들어 가는데 4가지 구간으로 나누어 볼 수 있는데 여기서는 크게 습한 구간과 건조 구간으로 나누어 볼 수 있고 건조 구간은 세부적으로 석탄 건조, 열분해, 촉 가스화 반응에 대하여 고려하여 모델

**Table 1.** Proximate and ultimate analysis in Hanna, Wyoming coal seam

Proximate analysis(%)	
Moisture	9.51
Volatile matter	32.64
Fixed carbon	34.09
Ash	23.76
100	
Ultimate analysis(%)	
Hydrogen	4.45
Carbon	54.81
Nitrogen	1.43
Oxygen	12.30
Sulfur	0.75
Ash	26.26
100	
Heating Value(kcal/kg)	4766.67

**Table 2.** RM 1 UCG Test Summary

Parameter	Value
Injection	
Oxygen, Nm <sup>3</sup> /day	23,410.02
Steam, Nm <sup>3</sup> /day	44,078.94
Production	
Dry Gas, Nm <sup>3</sup> /day	88,004.13
Heating Value, kJ/Nm <sup>3</sup>	326,514.07
Coal Gasified, kg/day	102,050.32

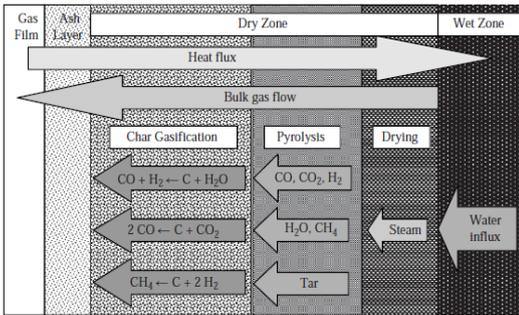


Fig. 1. Qualitative description of phenomena at the UCG cavity wall.

을 구현할 수 있다.

이에 대한 이해를 위하여 지중 석탄가스화시에 각 물리적, 화학적 반응과 현상에 대하여 일목요연하게 다음의 Fig. 1 에 표현되었다.

Fig. 1 에 나타난 구간 중 화 가스화 구간은 가스화 반응에 의하여 가스가 주로 생산되는 구역으로 스팀 가스화, CO<sub>2</sub> 가스화, 직접 수소화 반응으로 표현될 수 있다.

여기서 스팀과 CO<sub>2</sub> 가스화 반응은 지중 석탄가스화 cavity의 삼투특성으로 인하여 석탄광층이 압력을 가진 물로 포화되어 직접 수소화 반응보다 빠르게 이루어진다.

3가지 주요한 가스화 반응식을 적용하여 지중 석탄 가스화 반응에 대한 모델이 이루어질 수 있다[3].

### 2.3. 지중 석탄가스화 모델의 반응속도 연구

지중 석탄가스화 공정에서 가스화 반응이 일어날 때 반응 중 많은 부분의 열차는 고체의 미립자들로 인한 간섭을 받고 이에 대한 가스의 흐름은 충전층 반응기 (packed bed reactor) 의 형태를 가지고 일어난다. 많은 메커니즘으로는 다음과 같은 것을 포함한다[4].

- (가) 가스상에서의 반응물은 미립자 표면으로 이송되고 그것들과 반응된다. 그리고 생산물들은 가스 스트림으로 되돌아간다.
- (나) 주입된 산화제와 연화성 가스가 접촉되었을 때 순수하게 가스상 반응이 일어날 것이다.
- (다) 반응층에서의 열에너지는 뜨거운 영역에서 더 차가운 영역으로 전달된다 (연소 영역에서 벽 쪽으로).

반응 모델 선정에 있어서 가스의 흐름에 대한 판단이 필요하다. 지중 석탄가스화에서의 가스속도와 반응기의 길이 및 유효 분자 확산도 (effective molecular

diffusivity) 에 의해 결정되는 Peclet 수 (Pe) 로 가스 흐름에 따른 모델 선정이 가능하다. 이에 대한 조사로 반응기의 중앙에서 Pe 값이 10<sup>2</sup>~10<sup>5</sup>의 수치를 가지는 것에 대하여 판단하는 연구가 있었다[5].

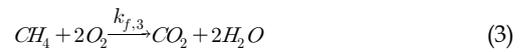
10<sup>2</sup>~10<sup>5</sup>의 Peclet 수치는 완전하게 균일 혼합 반응 (well mixed) 에서의 유체 흐름보다 관형 흐름의 유체 흐름을 보이는 것으로 판단된다[6].

본 연구에서는 위에 논의된 바와 같이 지중 석탄가스화에서의 가스화 반응 모델로 관형 흐름 반응기 (plug flow reactor) 모델을 적용하고 각각의 가스화 반응에 대하여 알맞은 반응속도의 변수들을 정의하여 모델에 적용시키고자 한다.

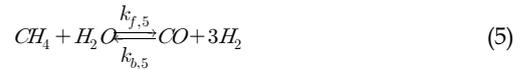
반응식으로는 멱수 법칙 속도론 (power law)을 적용하였다.

위에 제시된 지중 석탄가스화 공정 시뮬레이션을 위한 석탄가스화 반응에 대한 반응속도를 알아보기 위하여 가스상 반응인 균일 화학 반응 (Homogeneous Chemical Reactions)과 고체상 간의 반응인 불균일 화학 반응 (Heterogeneous Chemical Reactions)로 나눌 수 있다.

최 가스화 반응에 대하여 관찰하여보기로 한다. 그 중 가스상 반응은 아래의 식 (1)~(3) 와 같이 정리된다.



위의 3가지 가스 반응은 수소, 일산화탄소, 메탄의 연소반응식들이다. 이에 대해서는 k<sub>f,i</sub> 는 각각의 반응식에서의 정반응 속도를 나타낸다.



식 (4)~(5) 의 2가지 반응식은 일산화탄소와 메탄의 수성가스 반응으로 평형반응이다. 식에서 표시된 k<sub>f,i</sub> 와 k<sub>b,i</sub> 는 각각 반응에서 정반응과 역반응 속도를 나타낸다.

$$k_{f, k} = A_k T a_k \exp^{-E_k/RT} \quad (6)$$

**Table 3.** Factor of chemical reactions in Homogeneous

Reaction k	Rate Expression	A <sub>k</sub>	α <sub>k</sub>	E <sub>k</sub>	Reference
1	k <sub>f,1</sub> [H <sub>2</sub> ] <sup>1/4</sup> [O <sub>2</sub> ] <sup>2/3</sup>	2.50 x 10 <sup>+18</sup>	-1.0	167.4	[7]
2	k <sub>f,2</sub> [CO][O <sub>2</sub> ] <sup>1/4</sup>	3.98 x 10 <sup>+19</sup>	0.0	167.4	[7]
3	k <sub>f,3</sub> [CH <sub>4</sub> ][O <sub>2</sub> ] <sup>5/4</sup>	4.40 x 10 <sup>+15</sup>	0.0	125.5	[7]
4	k <sub>f,4</sub> [CO][H <sub>2</sub> O] - k <sub>r,4</sub> [CO <sup>2</sup> ][H <sub>2</sub> ]	2.78 x 10 <sup>+1</sup>	0.0	12.6	[8]
5	k <sub>f,5</sub> [CH <sub>4</sub> ][H <sub>2</sub> O] - k <sub>r,5</sub> [CO][H <sub>2</sub> ] <sup>3</sup>	3.12 x 10 <sup>+1</sup>	0.0	30.0	[9]

식 (6) 에서 표현된 식은 화학 반응 속도를 나타내는 아레니우스 식이며 A<sub>k</sub> 는 반응속도식의 빈도인자 (pre-exponential factor) 이며 단위는 (s<sup>-1</sup>)를 가진다. 또한, α<sub>k</sub> 는 반응속도식에서 온도지수 (temperature exponential) 이고 무차원 지수이며 E<sub>k</sub> 는 반응속도식의 활성화 에너지 (activation energy)를 나타내며 단위는 (kJ/mol)을 가진다.

위의 각각의 반응은 모두 다른 빈도인자, 온도지수, 활성화 에너지를 가지며 이를 통하여 아레니우스 식에서 정반응 속도를 결정하게 된다.

다음으로는 석탄에서 고체상인 탄소와 산소 및 스팀 등의 가스 사이의 반응인 불균일 화학 반응 (Heterogeneous Chemical Reactions)에 대하여 반응 속도식에 대하여 고려하였다.

최 가스화 반응에서 고려되는 가스와 고체상 간의 반응은 다음과 같이 4개의 반응으로 이루어진다.



지중에 있는 석탄은 주입되는 산소와 같이 연소 반응이 일어나면서 고온의 열이 발생되고 고온의 열이 발생되면 고체 상태인 탄소(carbon)가 산소 및 스팀과 함께 가스화 되는 반응이 일어난다.

위의 제시된 4가지 기체-고체 반응에 대한 반응상수를 다음의 Table 4 에 나타내었다.

여기서 A<sub>k</sub>, α<sub>k</sub>, E<sub>k</sub> 는 이미 논의된 균일 화학 반응에서의 의미가 동일하며 추가된 n은 멱수 법칙 지수 (power law exponent) 이다.

불균일 화학 반응에서 고체인 경우 고체의 특성에

**Table 4.** Factor of chemical reactions in Heterogeneous

Reaction k	n	A <sub>k</sub>	α <sub>k</sub>	E <sub>k</sub>	Reference
6	1.0	2.503 x 10 <sup>-17</sup>	1.0	179.4	[10]
7	0.5	8.593 x 10 <sup>+0</sup>	0.5	231.0	[11]
8	0.5	8.593 x 10 <sup>-1</sup>	0.5	211.0	[11]
9	1.0	2.337 x 10 <sup>-6</sup>	1.0	150.0	[12]

따라 화학 반응 속도가 다르게 된다. 이에 대하여 최의 특성에 따라 위의 반응들에 대하여 Greg Perkins에 의하여 제시된 식을 이용하여 반응속도를 표현하였다.

$$r_k = \frac{\phi_c}{\tau} \sqrt{\frac{8 \left( \frac{\nu_g}{\nu_c} \right) \left( \frac{k_{f,k}}{W_c} \right) D_{eff,i}}{d_{pore} (n+1)}} [C_i]^{n+1} \quad (11)$$

위의 식 (11) 은 rate expression 을 나타내며 각각의 정의는 다음과 같다.

Φ<sub>c</sub> : porosity of the coal

τ : tortuosity

n : order of the reaction

d<sub>pore</sub>: diameter of the pore

k<sub>f,k</sub> : intrinsic chemical reactivity of the char (kg of char m<sup>-2</sup> s<sup>-1</sup> [kmol of reactant/m<sup>3</sup>]<sup>n</sup>)

W<sub>c</sub> : molecular weight of the char

D<sub>eff</sub> : effective diffusivity (m<sup>2</sup>/s)

위의 식과 같이 최의 반응속도는 기공 사이즈나 분자량, 확산도에 따라 결정되어진다.

본 연구에서는 위에 제시된 여러 가지 파라미터에 대하여 기본 모델에 적용하기 위한 작업으로 각각의 인자들을 문헌조사를 통하여 결정하였다. 이에 대한

여 Table 5 에 나타내었다.

그리고 유효 확산계수의 경우 Knudsen 확산을 적용하게 되는데 이는 기공이 굉장히 작을 때 미립자 가스의 분자들이 다른 분자들보다 좌 기공벽에 자주 부딪힐 것을 예상한 식이다.

이에 대하여 Knudsen 확산 계수인  $D_{ki}$  에 대하여 Evans 에 의하여 개발되었다[15].

$$D_{ki} = 4850d\sqrt{T/M} \quad (12)$$

d : pore diameter (cm)

T : temperature (K)

M : molecular weight

**Table 5.** Characteristic parameter of char

Parameter	Symbol	Value	Reference
coal porosity	$\phi_c$	0.03	[13]
coal pore diameter	$d_{pore}$	0.0005 cm	[10]
pore structure tortuosity	$\tau$	2.5	[14]

위의 Table 5 를 통하여 구해진 좌의 특성치를 가지고 Evans 에 의해 제시된 Knudsen 확산 계수를 구하는 식을 적용할 수 있다. 산소, 스팀, 이산화탄소, 수소에 대하여 계산된 값을 Table 6 에 나타내었다.

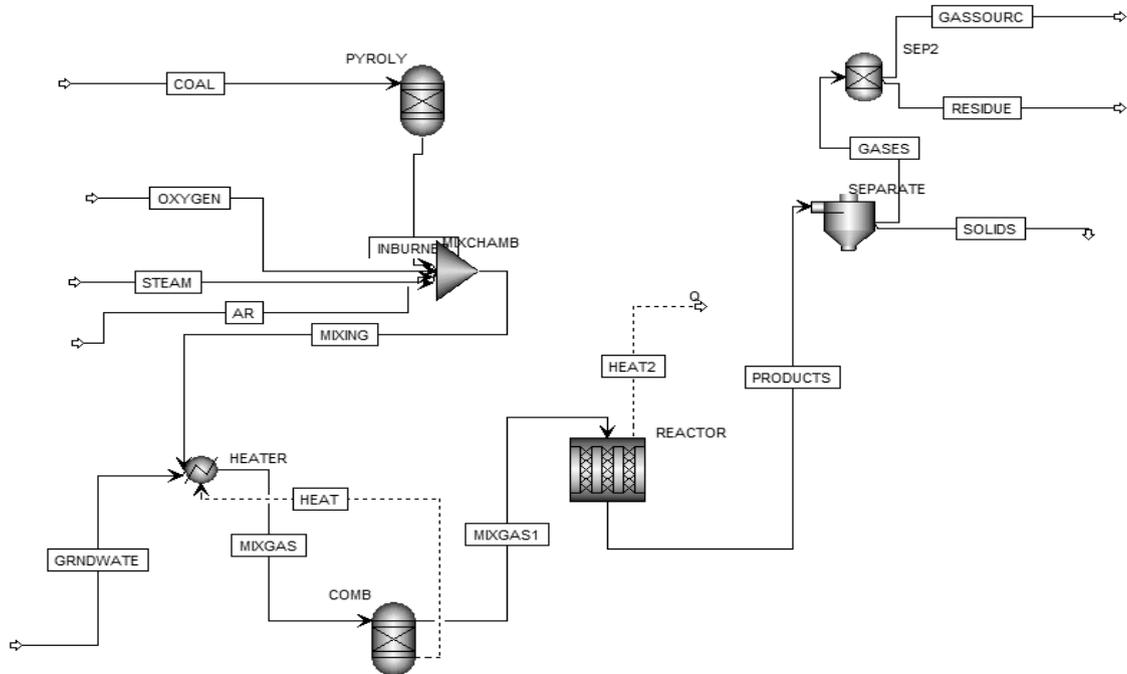
좌 가스화 반응에서 균일 화학반응과 불균일 화학 반응에 대한 위의 제시된 방법론을 통하여 본 연구에서 진행하는 지중 석탄가스화 공정 시뮬레이션에서의 관형 흐름 반응기의 주어지는 반응속도 수치 값들을 계산하여 적용시키도록 한다.

**2.4. 지중 석탄가스화 공정 Aspen Plus 시뮬레이션**

Aspen Plus 공정 프로그램 툴을 사용하여 나타낸 지중 석탄가스화 공정 모델 개념도는 주입부, 건조 및

**Table 6.** Knudsen diffusion coefficient following gas

Knudsen diffusion coefficient, $D_{ki}$	
O <sub>2</sub>	13.557
H <sub>2</sub> O	18.067
CO <sub>2</sub>	11.559
H <sub>2</sub>	54.009



**Fig. 2.** Diagram of underground coal gasification by Aspen Plus.

열분해, 연소, 가스화 부분으로 나뉘게 된다. 이에 대하여 Fig. 2 에 나타내었다.

주입부에서는 석탄, 산소, 스팀, 아르곤으로 구성되어 있다. 석탄의 주입 스트림의 경우 실제 지중 석탄가스화 플랜트에서는 석탄이 지중에 매장되어 있고 산화제와 스팀이 주입되어 가스화가 일어나지만 Aspen Plus 공정 모델에서는 정상상태 (Steady-State)를 모사하는 것으로써 반응되는 석탄만큼의 양을 추산하여 석탄량이 들어가게 된다.

다음으로는 건조와 열분해 과정이 일어나는데 여기서 석탄의 휘발분 반응에 대해서는 수율(yield) 반응 모델을 적용하였다. 여기서 휘발분 (Volatile Matter)은 일산화탄소, 이산화탄소, 수소, 스팀, 메탄 등의 가스로 분해되는데 각 수율은 실험값을 통해서나 반응 속도 조사를 통하여 시뮬레이션이 가능하다. 이에 대한 정보로는 Perkins 에서의 실험데이터를 사용하였다[5].

Table 7 에서 보이는 수치들이 석탄의 휘발분에 대한 수율로 선정된 이유는 참고 문헌이 지중 석탄가스화에 대한 데이터이고 또한, 사용된 석탄이 아역청탄으로써 기본 모델에 적용될 석탄도 또한 아역청탄이고 공업분석과 원소분석이 비슷한 결과를 가지고 있기 때문이다.

다음으로는 가스화 반응에서의 연소반응 모델이다. 이는 좌의 가스화 반응이 일어날 때 먼저 시작하는 것으로 자연점화로 인한 열에 의하여 석탄이 건조되고 휘발분이 날아가면서 생기는 가스와 탄소의 연소반응을 고려할 수 있는데 본 모델에서는 탄소와 산소의 반응이 불균일 화학반응이며 이에 대한 반응이 일어나기 위해서는 열이 필요하므로 이에 대하여 가스

연소 반응인 수소, 일산화탄소, 메탄과 산소의 연소반응을 고려하여 적용하였다.

연소반응으로 생긴 열로 인하여 앞 절에서 고려된 반응속도 파라미터와 식을 적용하게 된다. 이 모델에서는 관형 흐름 반응기로 적용이 되었으며 산소와 좌의 반응 및 스팀과 좌의 반응이 일어나게 되는 부분이다.

마지막 부분은 가스화를 통해 생성된 합성가스를 분석하기 위하여 고체 및 가스 성분으로 나누고 이에 대한 에너지 및 물질 수지를 체크하기 위해 구성되었다.

추가적으로 모델에서 고려된 사항으로는 압력 강하 (pressure drop) 4.8~7.574 bar, 지하수 유입량 (groundwater influx) 2~4 gal/min 인 것과 온도기준 726.67 °C 에서 체류시간 (residence time) 10~20분으로 고려된 것을 들 수 있다.

### III. 시뮬레이션 결과

본 연구의 기본틀로 계속적으로 반복하여 제시한 것이 Wyoming 주의 Hanna 석탄광층의 Rocky Mountain 1 프로젝트를 기본 모델로 선정한 것이다. 이는 무엇보다 자료적인 측면이나 오랫동안 Wyoming 주의 Hanna 석탄광층에서 지중 석탄가스화 실험이 진행되었고 석탄 또한 아역청탄으로 모델 구현에 있어서 반응속도 파라미터 적용을 할 수 있기 때문이었다.

본 절에서는 위에 이론적인 방법들과 실제로 Aspen Plus 로 공정을 구성하여 여러 가지 입력 값 및 파라미터들을 적용시켰을 때의 결과를 확인하고자 한다.

먼저 기본으로 선정된 Rocky Mountain 1 프로젝트에 대하여 실험 데이터 결과를 확인하도록 한다.

Table 8 는 프로젝트 보고서에서 지중 석탄가스화 실험에 대한 합성가스 조성 결과를 보여준다.

**Table 7.** Composition of the Volatile Matter (Mass Basis)

Component	Mass Fraction
CO	0.1242
CO <sub>2</sub>	0.2413
H <sub>2</sub>	0.0414
H <sub>2</sub> O	0.0472
CH <sub>4</sub>	0.2531
C <sub>2</sub> H <sub>6</sub>	0.0000
H <sub>2</sub> S	0.0221
tar	0.2500
N <sub>2</sub>	0.0206

**Table 8.** Syngas yield of base experimental result for Hanna coal seam

Gas Composition, Mole %	
H <sub>2</sub>	32.7
CH <sub>4</sub>	10.1
CO	8.2
CO <sub>2</sub>	45.7
H <sub>2</sub> S	0.8
N <sub>2</sub>	0.5
Ar	0.2
Higher Hydrocarbons	1.8

실험 데이터를 확인한 결과, 이산화탄소가 45.7%의 몰비율을 가지는데 이는 연소 반응이 많이 일어나는 것을 확인해 볼 수 있으며 수소의 발생도 많은 편으로 나타나고 있다. 추가적인 사항으로는 탄화수소 계열이 1.8%로 나타났는데 Aspen Plus 공정 모델에서는 탄화수소로 가스상인 프로판(C<sub>3</sub>H<sub>8</sub>)으로 가정하였다.

위의 방법론과 실험 데이터를 바탕으로 기본 모델에 대하여 시뮬레이션을 진행하였고 이에 대한 검증을 하고자 한다. 검증에 대한 방법으로는 기본 모델로 선정된 Wyoming 주의 Hanna 석탄광층의 합성가스 결과의 비교를 통하여 이루어진다.

이미 실제 실험을 통한 합성가스 결과는 Table 8에 제시를 하였다. 시뮬레이션을 통해 나타난 결과를 검증하기 위해 Table 8에 보인 합성가스의 실험 결과와 시뮬레이션 결과를 Table 9에 비교하여 나타내었다.

지중 석탄가스화 공정 시뮬레이션에 대하여 위와 같이 실험 데이터와 비슷한 결과를 얻을 수 있었다. 합성가스 조성의 결과 비교와 함께 탄소 전환율(carbon conversion)과 냉가스 효율(cold gas efficiency)을 같이 비교하여 결과 확인을 하고자 한다. 이에 대한 식은 다음과 같다[16].

$$\text{탄소 전환율(\%)} = \left[ 1 - \frac{\text{가스화 잔류 탄소} \left[ \frac{\text{kmol}}{\text{h}} \right]}{\text{투입연료 내탄소} \left[ \frac{\text{kmol}}{\text{h}} \right]} \right] \times 100$$

$$\text{냉가스 효율(\%)} = \frac{\text{연료가스 발열량}(MW)}{\text{투입연료 발열량}(MW)} \times 100$$

**Table 9.** Syngas yield of experimental results and simulation result for Hanna coal seam

Gas Composition, Mole %	Experimental Results (Hanna)	Simulation Results (Hanna)
H <sub>2</sub>	32.7	32.7
CH <sub>4</sub>	10.1	10.6
CO	8.2	7.7
CO <sub>2</sub>	45.7	44.3
H <sub>2</sub> S	0.8	1.1
N <sub>2</sub>	0.5	1.3
Ar	0.2	0.2
Higher Hydrocarbons	1.8	2.0

위의 2가지 식을 이용하여 탄소 전환율과 냉가스 효율을 구할 수 있다. 이에 대하여 본 시뮬레이션 결과를 확인해 볼 수 있다.

시뮬레이션의 결과로 계산된 탄소 전환율은 11.14%로 계산되었다. 이는 석탄과 산소량이 1:1 일 때 많은 량의 탄소가 가스화 되지 않은 것을 의미하고 이는 결과상 반응온도에서 찾을 수 있다. 생성되는 가스 스트림의 반응온도는 704.5°C이며 이는 탄소와 산소의 반응이 많이 일어나지 않은 온도이다. 그러나 문헌에서도 1000K (726.85°C)로 언급되고 있으며 이러한 결과가 나타난 이유는 실제 실험에서의 산소량과 주변에서 유입되는 지하수의 유입량이 영향을 주는 것으로 판단된다. 냉가스 효율도 4.95%로 굉장히 낮은 수치를 가지며 이도 산소량과 지하수의 영향으로 판단된다.

그러나 한 가지 추가로 고찰할 것으로 시뮬레이션 결과 중 탄소 전환율과 냉가스 효율의 결과에 대해서 일반가스화와 다르게 낮은 수치로 나타난 것은 주입되는 석탄의 양이 문헌에서도 찾아볼 수 없듯이 명확하지 않고 가상으로 입력하였기 때문이다. 지중 석탄 가스화는 일반가스화와 다르게 일정량의 석탄을 주입시키면서 반응을 시키는 것이 아니라 저장되어있는 석탄광층에 직접 반응을 일으키기 때문에 얼마의 석탄이 반응되었는지 실제로는 알 수 없기 때문이다. 이에 대한 보완되는 결과로 생성된 가스량을 더불어 확인함으로써 시뮬레이션 결과의 신뢰성을 다시 추가적으로 판단할 수 있을 것이다.

실제 실험 데이터에 나와 있는 합성가스의 생산량은 102,050.32 kg/day로 계산된다. 이에 대비한 시뮬레이션 결과에서의 합성가스의 생산량은 100,492.98 kg/day로 계산된다. 이는 1.55%의 차이를 갖는 것으로 나타났으며 어느 정도의 신뢰를 가진다고 판단된다.

위에 제시된 시뮬레이션 모델을 통하여 다음의 민감도 분석을 실시하였다. 민감도 분석 결과는 산소와 스팀에 따른 합성가스의 조성을 확인해 보도록 한다.

Fig. 3은 산소량에 따른 합성가스 조성 결과를 보여 주고 있다. 산소량은 기본 모델에서 2배까지 증가를 시켰으며 산소의 증가량은 100 kg/hr씩 증가하는 것으로 설정하였다.

민감도 분석 결과 산소량의 증가에 따라 합성가스의 수소, 메탄, 일산화탄소의 수율이 증가됨을 알 수 있다. 이는 실험 데이터를 기본으로 하여 완성된 모델에서는 산소량의 증가로 충분한 가열이 되지 못하고 오히려 많은 산소량이 연소반응을 방해하여 이산화탄소의 수율 감소로 합성가스에서 타가스의 수율이 증가됨을 확인해 볼 수 있다. 이는 새로운 지중 석탄가스화에서 산소량에 따른 적합한 주입 온도를 다시 설정해야 할 것으로 판단된다.

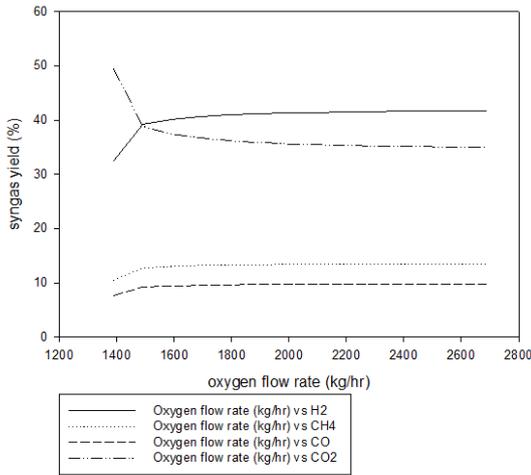


Fig. 3. Syngas yield of following different mass flow of oxygen.

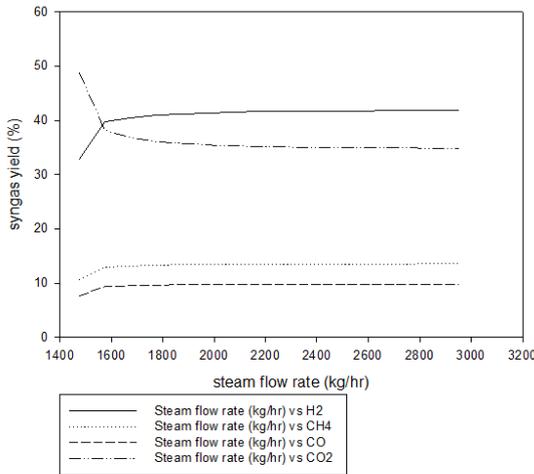


Fig. 4. Syngas yield of following different mass flow of steam.

Fig. 4을 통해서서는 스팀량에 따른 합성가스 조성 결과를 보여주고 있다. 스팀량도 산소량과 동일하게 2배 까지 증가를 시켰다. 스팀량 또한 충분한 가열이 되지 못하고 많은 스팀량이 연소반응을 방해하는 결과로 나타났다. 스팀에 대해서도 적합한 주입 온도를 시뮬레이션에서 반복 계산을 통하여 선정할 수 있을 것으로 판단된다. 이는 앞으로 선정될 새로운 석탄광층에서의 지중 석탄가스화 프로젝트 개발 시 본 모델을 통하여 예측해 볼 수 있을 것으로 판단된다.

#### IV. 결론

본 연구는 에너지원 중 하나인 석탄에 대하여 채굴하기 어렵고 많은량이 매장되어 있는 지하 속 석탄을 목표로 전력, 청정 화학 원료 생산을 할 수 있는 지중 석탄가스화 공정에 대한 기초 연구로써 화학 공정틀인 Aspen Plus를 이용하여 지중 석탄가스화 시뮬레이션 진행을 하고 검증과 민감도 분석을 하였다. 여러 가지 이론적인 방법과 문헌 조사를 통하여 Wyoming 주의 Hanna 석탄광층을 기본 모델로 선정하여 이에 대한 조건들로 지중 석탄가스화 공정 모델을 완성 후 실험 데이터와 비교를 하여 검증을 하였다. 또한, 민감도 분석으로 산소량, 스팀량에 따라 생산되는 합성가스의 조성을 검토해 보았고 이에 대한 결과로는 산소, 스팀량의 증가에 따라 수소, 메탄, 일산화탄소의 수율은 증가하고 이산화탄소의 수율이 감소하는 결과로 나타났다. 이는 많은 산소, 스팀량과 지하수의 유입이 열역학적 효율을 감소시키는 것으로 판단되며 본 연구를 통해 관찰된 사항으로 산소량, 스팀량에 따라 주입시 새로운 온도조건 변수를 주어야 할 것으로 판단하였다. 본 연구에서 개발된 모델을 통하여 미개척 탄광에서 각 변수에 따른 적합한 온도조건을 결정하는데 활용 할 수 있을 것으로 판단하며 이에 대한 고찰은 향후 연구로 남겨두고자 한다.

#### 감사의 글

본 연구는 한국가스공사 연구개발원 자원기술연구센터에서 “2012년 대학협력과제 연구지원계획” 사업의 일환으로 지원되어 진행된 연구입니다.

#### 참고문헌

- [1] U.S. Department of Energy Office of Fossil Energy, “Hanna, Wyoming Underground Coal Gasification Data Base”, (1985)
- [2] Martin, J.W. and A.M. Hartstein, “UCG Program Overview. In Proceedings of the Fourteenth Annual Underground Coal Gasification Symposium, Chicago, Ill. DOE/METC 88/6097 (DE88001093)”, (1988)
- [3] DAVID A BELL, BRIAN F TOWLER, MAO-HONG FAN, “Coal Gasification and Its Applications”, 104, (2011)
- [4] C.B Thorsness, S.-W. Kang, “Further development of a general-purpose, packed-bed model for analysis of underground coal gasification

- processes", (1985)
- [5] Greg Perkins, Veena Sahajwalla, "Steady-State Model for Estimating Gas Production from Underground Coal Gasification", *Energy & Fuels*, 22, 3902-3914, (2008)
- [6] Levenspiel, O., "Chemical Reactor Engineering", John Wiley and Sons, New York, (1972)
- [7] Westbrook, C., Dryer, F. L., "Chemical kinetic modeling of hydrocarbon combustion", *Prog. Energy Combust. Sci.* 10, 1-57, (1984)
- [8] Di Blasi, C., "Dynamic behaviour of stratified downdraft gasifiers", *Che. Eng. Sci.* 55, (2000)
- [9] Govind, R., Shah, J., "Modeling and simulation of an entrained flow coal gasifier", *AIChE J.* 30, 79-91, (1984)
- [10] Perkins, G., "Mathematical modelling of underground coal gasification", Ph.D. Thesis, The University of New South Wales, Sydney, Australia, (2005)
- [11] Roberts, D.G., Harris, D.J., "Char gasification with O<sub>2</sub>, CO<sub>2</sub>, and H<sub>2</sub>O : Effects of pressure on intrinsic reaction kinetics", *Energy Fuels*, 14, 483-489, (2000)
- [12] Tomita, A., Mahajan, O. P., Jr., "Reactivity of heat-treated coals in hydrogen", *Fuel*, 56, 137-144, (1977)
- [13] A.D. Youngberg, "Hydrogeologic evaluation of the HANNA coal gasification site", Laramie Energy Technology Center, Laramie, Wy 82071
- [14] A. BLIEK, J. C. LONT and W. P. M. VAN SWAAIJ, "Gasification of coal-derived chars in synthesis gas mixtures under intraparticle mass transfer-controlled conditions, *Chemical Engineering Science*, 41(7), 1895-1909, (1986)
- [15] Abhishek Dutta, "Multicomponent gas diffusion and adsorption in coals for enhanced methane recovery", *Energy Resources Engineering of Stanford University*, (2009)
- [16] Christopher Higman and Maarten van der Burgt, "Gasification - Second Edition", (2008)